arXiv:2305.01132v1 [physics.flu-dyn] 2 May 2023

MFiX-PIC 确定性校准与贝叶斯校准的比较，第 1 部分：沉降床

预印本

Aytekin Gel [1, 2*]
[1] 国家能源技术实验室，
柯林斯费里路 3610 号，
西弗吉尼亚州摩根敦，邮编 26505
[2] ALPEMI Consulting, L.L.C.
8205 S Priest Dr #13951
亚利桑那州坦佩市
85284

Avinash Vaidheeswaran [1,3]
[1] 国家能源技术实验室，
3610 Collins Ferry Road，
摩根敦，WV 26505
[3] NETL 支持承包商，
3610 Collins Ferry Road，
摩根敦，WV 26505

Mary Ann Clarke [11] 国家能源技术实验室，3610 Collins Ferry Road 摩根敦，WV 26505

2023年5月3日

关键字 颗粒多相流 · 重力作用下的颗粒沉降 · 计算流体力学（CFD） ·粒子单元法（PIC） · 不确定性量化（UQ） · 确定性校准 · 贝叶斯校准

摘要

近年来，粒子单元法（PIC）因求解效率高，已广泛用于致密颗粒流的建模。该方法适用于大规模系统建模，且计算成本相对较低。然而，这种方法需要定义若干经验参数，而这些参数的影响尚未得到充分理解。因此，需要采用系统方法来识别这些参数的敏感性并确定其最优设置。目前已知，这些参数的选择取决于问题的流态。例如，沉降床与流化床所采用的参数值会有所不同。本研究针对高密度介质中颗粒沉降的情形，选取了五个不同的 PIC 模型参数进行校准。研究采用了开源软件 MFiX 中的 PIC 实现（MFiX-PIC）。本研究在先前工作的基础上，采用一种通常称为贝叶斯校准的统计校准方法，对这五个模型参数设置进行评估，并将结果与确定性校准进行比较。结果显示，与确定性校准相比，贝叶斯校准使预测精度最高提高了 6.5 倍。

1 引言

含颗粒流体广泛存在于化工、制药、能源和食品等许多工程应用领域。基于模拟的工程（SBE）已广泛用于设计、排查故障并优化此类系统，同时尽可能降低其运行成本。近年来，对工业规模系统建模的需求日益增长，而采用离散元模型（DEM）等传统模拟技术可能面临挑战。当颗粒数量超过数千万量级时，追踪单个颗粒及其与邻近颗粒的碰撞可能会变得计算上难以实现。尽管硬件

*通讯作者，电子邮箱：aike@alpemi.co m

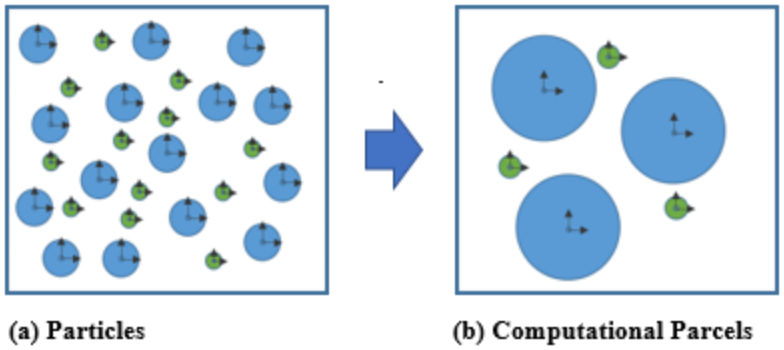

图 1：将多分散颗粒聚集为计算颗粒包的示意图，改编自 Clarke 和 Musser（2020）。(a) 一个填充了颗粒的单元。(b) 对每个固相应用统计权重后，同一个单元的情况。

高性能计算资源正在快速发展，工业规模模型仍可能面临不合理的计算周转时间。因此，这一问题促使人们开发粗粒化策略，例如粗粒化离散元法（CGDEM）或粒子单元法（PIC），这些方法在精度与求解时间之间进行权衡。

近期，美国能源部国家能源技术实验室（NETL）的多相流科学组采用了一种系统化方法（Gel 等人，2018）来生成高质量数据（Vaidheeswaran 等，2017；Gel 等人，2018；Vaidheeswaran 等，2020a；Vaidheeswaran 和 Rowan，2021；Vaidheeswaran 等，2022；Higham 等，2020；2021；Gao 等，2020；Lu 等，2020；Li 等，2022），并将其用于验证、敏感性分析、不确定性量化（UQ）或校准。此前的若干研究（Vaidheeswaran 等，2020b；2021）通过全局敏感性分析，分析了不同 MFiX-PIC 模型参数的参数敏感性。尽管敏感性分析能够表明所选参数对模拟中感兴趣量（QoI）的影响，但该方法无法量化理想的输入参数值。因此，本研究探索确定性校准与贝叶斯推断，分别用于确定特定 MFiX-PIC 模拟的最优单值或区间输入参数。通常，模型参数预计会随流体动力学变化，正如 Vaidheeswaran 等（2021）所述。本研究关注颗粒在高密度介质中的沉降，其中 $U/U_{mf} < 1$。本文工作拓展了此前的研究（Gel 等，2021），该研究确定了一组最优的 MFiX-PIC 模型参数。然而，在上述研究之后，MFiX-PIC 开发人员修复了一个可能影响原研究的软件错误。因此，本研究重新运行了模拟，并更新了通过确定性校准得到的参数。此外，本研究还介绍了贝叶斯推断，以给出模型参数的分布。
本文预印本的组织结构如下：首先，第 2 节概述 MFiX-PIC 方法。第 3 节介绍校准方法及所用软件的背景。第 4 节描述问题设置，随后给出确定性校准结果，并将其与贝叶斯推断结果进行比较。预印本还设有单独的数据管理与代码仓库一节（附录 A），其中包含复现校准分析所需的信息。

2 MFiX-PIC 概述

PIC 方法通过将颗粒表示为计算颗粒包来建模。每个颗粒包所代表的颗粒数量由统计权重 W_p决定，该权重由用户输入。在本案例研究中，W_p 是纳入校准的模型参数之一。假设每个颗粒包中的单个颗粒均为球形，且具有相同的属性。对于固相包含多个组分的系统，每种组分都分配单独的统计权重。图 1 展示了一个二元混合物，其中 W_p = 5 对应蓝色颗粒，W_p = 4 对应绿色颗粒。

粒子的位置 X_i 通过以下方式更新，

$$U_i = \frac{dX_i}{dt} \tag{1}$$

其中，速度 U_i 通过求解线性动量方程得到，具体如下：Clarke 和 Musser（2020），

$$W_p m_p \frac{dU_i}{dt} = W_p(m_p g_i + \frac{m_p}{\epsilon_s \rho_s}\nabla\tau_p) + S_{mi}^{(p)} \tag{2}$$

g_i 是坐标方向 i 上由重力引起的加速度。ρ_s、m_p、ϵ_s 分别表示固相的密度、质量和体积分数。S_{mi}^{p} 是结合了相间曳力项和压力梯度项的源项，其表达式为：

$$S_{mi}^{p} = W_p(-\frac{dP_g}{dx_i}V^{(p)} + \beta_g^{(p)}V^{(p)}(U_{gi} - U_i^{(p)})) \tag{3}$$

式 2 中粒子间应力项 τ_p 的实现并非易事。应力首先被计算为，

$$\tau_p = \frac{P_o \epsilon_s^{\beta}}{\max[\epsilon_s^* - \epsilon_s, \delta(1-\epsilon_s)]} \tag{4}$$

P_0、β 和 ϵ_s^* 是经验参数，本研究也将其纳入校准范围。参数 δ 用于避免计算过程中出现奇异点，默认值为 10^{-7}。一旦求得 τ_p，便使用其梯度来确定颗粒间应力对粒子包运动的实际贡献 δu_p，如以下伪算法所述（Vaidheeswaran 等，2021）：

如果 $\nabla\tau_p \leq$0PIC 速度分量 =min(δu_p,α*滑移速度) PIC 速度分量 = max(PIC 速度分量,0) 否则如果 $\nabla\tau_p$>0PIC 速度分量 =max(δu_p,α*滑移速度) PIC 速度分量 = min(PIC 速度分量, 0) 结束如果

在上述逻辑中，α 是用户输入值，应用于固体滑移速度，以考虑相邻颗粒包之间的相对动力学。α 是本研究中用于校准的最终模型参数。
有关 MFiX-PIC 以及在 MFiX-PIC 中实施 PIC 方法的更多信息，请参阅 Clarke 和 Musser（2020）。

3 所采用的方法与软件框架

本报告所述的 MFiX-PIC 校准分析采用了若干先进的不确定性量化方法和不确定性量化软件工具包。因此，本节将简要介绍这些方法和工具包。请注意，本报告并非旨在向读者讲授统计分析的理论基础及其与校准的关系，也不旨在讲解相关软件的使用方法。因此，本节各小节均提供了更多参考资料，以便用户在需要时查阅更全面的指导。

3.1 模拟活动与代理模型构建

为计算模拟校准输入参数，用户首先需要定义关注量/响应变量。这些是可测量的值，能够普遍地表征模拟的准确性。影响这些关注量的输入参数可能有很多，而且改变这些参数所产生的影响可能彼此相关。例如，为单个响应变量校准五个输入参数，可能需要进行数千次评估，才能找到一组最优参数，使模拟得到的关注量与实验得到的关注量之间的残差最小。为了避免运行数千次模拟，通常会构建代理模型（也称响应面或元模型），并用它来预测模拟结果。

代理模型种类繁多，形式和功能各异。本研究创建了一个数据拟合代理模型，通过覆盖用户指定输入参数范围的采样模拟，表征响应变量与输入参数之间的关系。在本文中，术语 模拟活动 指经过精心设计的模拟样本，其目的是建立输入参数与响应变量之间的数值关系。在此方法中，模拟代码（例如 MFiX-PIC）被视为黑箱，并作为预先规划的大型模拟活动的一部分，为每个采样模拟运行。

直观而言，模拟活动中的采样模拟数量似乎对构建可靠的数据拟合代理模型起着至关重要的作用。事实上，模拟活动采用数学定义的空间填充特性进行设计，以确保每个输入参数的取值范围内都有足够的采样点。计算实验的一种常见采样方法是拉丁超立方（LH）采样（Viana，2013）。本研究采用一种特定的最优拉丁超立方（OLH）采样方法，该方法利用距离度量有效地分布输入参数，使其充分覆盖用户定义的范围，同时确保样本彼此相距较远。
按照以下工作流程设计模拟活动并构建数据拟合代理模型：

1. 确定采样模拟中要系统变化的模型输入参数，以及要从结果中提取的关注量。为协调所有利益相关者并尽量避免日后产生分歧，我们采用了一项调查（Gel 等人，2018），从参与其中的研究人员、主题专家及其他利益相关者处收集详细信息。经过几轮迭代，调查明确了关键问题，例如要探索多少个输入参数，以及在模拟活动中这些参数的上下界。2. 运用 OLH 采样原则设计模拟活动。本例中，在特定范围内确定了六个模型输入参数。尽管模拟活动针对三个关注量开展，但在确定性校准中仅考虑第二个关注量（即充填激波位置）。每个输入参数取 20 个样本，因此设计了包含 120 个样本的初始模拟活动。3. 在目标高性能计算（HPC）系统上启动并监控模拟活动。4. 对模拟结果进行后处理，构建表格数据集，其中每一行都显示六个模型参数设置，以及对应于该次采样模拟的各关注量模拟结果。后处理后的数据集以 ASCII文件形式保存，其中包含模型参数的试验设计，以及模拟活动结果中与之对应的关注量。5. 将表格数据集导入所使用的不确定性量化工具包软件，并测试不同的代理模型选项，运用各种统计指标确定适用于给定数据集的最佳数据拟合代理模型。例如，采用交叉验证误差评估来评估数据拟合代理模型的质量。

确定了最佳的数据拟合代理模型后，在后续校准过程中始终使用该代理模型，以替代进一步的 MFiX-PIC 模拟。构建数据拟合代理模型是此次校准工作中最耗时的部分。有关代理模型构建的详细讨论，包括误差最小化，请参阅 Gel 等人（2013a）、Gel 等人（2013b）和 Gel 等人（2016）的早期研究。

3.2 敏感性分析

敏感性分析是一种不确定性量化技术，用于回答一个重要问题：“哪些输入参数对某个关注量的影响最大？”在校准过程中，敏感性分析发挥着关键作用，尤其是在输入参数数量超过三个时。该技术能够定量确定对每个关注量影响最大的参数，并可用于集中实验人员的注意力，特别是在资源有限的情况下。在本研究中，敏感性分析确定了两个关键模型输入参数，此外还确定了一个未被指定进行校准的设计变量。如果实验资源有限，这将立即调整校准工作的重点，并减少物理测试。然而，本研究关注的问题（颗粒沉降）具有解析解，因此无需进行物理实验，并且对利益相关者确定的全部输入参数范围进行了全面考察。不过，对于后续研究案例（流化床和循环流化床），实验数据集将受到限制，预计敏感性分析将在指导校准工作方面发挥重要作用。因此，本文在此介绍该方法。

本报告后文（图 13）所示的敏感性分析结果采用基于 Sobol’ 指数的全局敏感性分析方法获得，该方法是处理非线性响应行为问题时的首选方法。在计算 Sobol’ 指数时，使用数据拟合代理模型执行函数评估，以计算关注量。有关该方法的更多信息，请参阅 Sobol（2001）以及 Iooss 和 Lemaître（2015）；有关该方法在多相流模拟中的应用示例，请参阅 Gel 等人（2013a）和 Gel 等人（2013b）。此外，Vaidheeswaran 等（2020b）介绍了一项针对所关注问题开展的详细敏感性分析研究，该研究使用了 Nodeworks 软件。

3.3 校准

计算模型通常包含经验输入参数以及物理可观测输入参数。例如，在 MFiX-PIC 中，只有紧密堆积分数会被视为物理可观测量；所有其他输入参数都是经验性的。校准旨在借助可观测数据（例如实验）调整输入参数，使计算模型在模拟中再现预期的物理现象。

图2展示了一幅简图，用于说明校准的目标（Adams 等人，2015）。在此示例中，假设正在分析流化床反应器中的瞬态温度行为。随时间变化的温度分布以蓝线表示。这就是模拟的目标，最有可能是传感器的观测值或实验中的测量值。然后考虑一个计算模型 $s(t;\theta)$，该模型旨在通过模拟捕捉随时间变化的温度行为（红线）。该模型需要各种输入参数 θ（例如传热系数）。需要注意的是，大多数计算模型通过采用各种假设来简化实际的主导物理规律，因此无法捕捉完全准确的物理行为；如图所示，这就导致目标结果与模拟结果之间存在差异。

尽管某些模型输入参数可能具有理论基础，但模拟过程中用于这些参数的设置通常被视为不确定的。校准过程旨在通过调整 θ 参数的设置，最小化目标输出与模拟输出之间的差异。这一过程在代表目标的观测值或实验数据的指导下完成。通过缩小目标结果与模拟结果之间的差异，校准在提高模拟结果针对特定应用的可信度方面发挥着重要作用。

此时，有必要指出验证与校准之间的区别。验证是在不进行调参的情况下，将模拟结果直接与实验结果进行比较。可以通过验证确定实验与模拟之间的基线差异，并利用该信息说明模型需要进行校准。验证和校准始终都是针对一组特定的可观测数据进行的，这使得实验数据的可信度至关重要。在推广校准研究所得出的见解时，必须进行谨慎考虑，尤其是在将先前校准过的输入参数应用于新的模拟时。有关验证与校准之间区别的更多信息，请参阅 Trucano 等人（2006）。

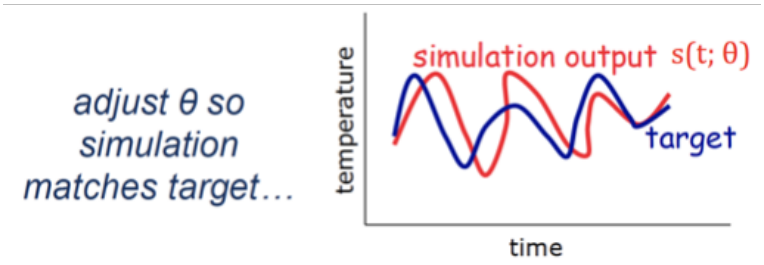

图2：计算模型校准示意图，摘自 DAKOTA 校准培训（Adams 等人，2015年）。

通常，需要同时校准多个输入参数（即 $\theta_i,\ i=1,\ n$）。这种情况带来了独特的挑战，尤其是在实验数据有限的情况下。因此，文献中出现了许多不同的校准方法（Adams 等人，2015年）。

一般来说，校准方法分为两类：（i）确定性校准方法；（ii）统计校准方法。后者会给出校准后模型参数的分布，而非确定性校准所得到的单一数值。两者的另一项主要区别在于，统计校准能够在校准模型输入参数时考虑模型偏差（亦称模型形式不确定性）。然而，统计校准方法通常需要掌握马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）等复杂方法和算法。另一方面，确定性校准更易于理解，并广泛应用于各种具备优化能力的软件工具中。

3.4 确定性校准

确定性校准的目标是找到 $\boldsymbol{\theta}$ 的取值：$\{\theta_1 \dots \theta_m\}$，使一组模拟与其对应实验之间的残差误差最小化。公式 5 作为该

优化问题（Adams 等人，2015）的目标函数。它表示在模拟中使用这组 $\boldsymbol{\theta}$ in n 所产生的残差误差平方和。

$$\underset{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}}{\text{minimize}} f(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} [S_i(\boldsymbol{\theta}) - y_i]^2 = \sum_{i=1}^{n} [R_i(\boldsymbol{\theta})]^2 \tag{5}$$

其中， $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_1 \dots \theta_m\}$ 为正在进行校准的建模参数， y_i 为从 n 次实验中观测到的 i^{th} 实验数据， $S_i(\boldsymbol{\theta})$为作为 $\theta_1 \dots \theta_m$的 i^{th} 实验数据的模拟结果， $R_i(\boldsymbol{\theta})$为 i^{th} 残差（模拟结果 - 实验结果）， $\mathbb{R}$ 为建模参数的实数集合

根据问题的性质，可以采用各种局部和全局优化技术来求解方程 5 所示的残差最小化问题。在此背景下，统计校准与确定性校准之间的一个重要区别是：统计校准的结果是各个 $\boldsymbol{\theta}$ 参数的估计分布，而确定性校准则为每个正在进行校准的模型参数提供一个单一的标量值。

3.4.1 确定性校准工作流程

以下概述的工作流程用于在本研究中执行确定性校准。为直观展示，同一工作流程如图 3 所示:

1. 确定需要校准的模型参数，并确定校准期间所使用的每个参数的上下界。2. 准备用于指导校准过程的实验数据集或观测值，并将其保存为 ASCII 输入文件。3. 借助统计试验设计原理规划模拟活动，以便构建数据拟合代理模型。代理模型应充分表征作为输入的模型参数与响应变量（又称关注量或输出）之间的关系。当模拟执行成本高昂或耗时较长时，此步骤至关重要，因为优化过程需要以较低的计算成本执行数千次函数评估。4. 对模拟活动结果进行后处理，并编制一个 ASCII文件，作为表格数据集，其中包含模型参数的试验设计以及来自模拟活动结果的相应关注量。对于校准，需要单独的数据集来包含实验观测值。应将其准备为 ASCII 格式，以便导入 UQ软件。对于当前应用，有一个解析解可用，因此使用该解析解代替实验观测数据。通过改变控制参数（x_1：初始固体浓度）创建了二十一个样本。

5. 使用不确定性量化工具包（PSUADE、Nodeworks）导入数据集，并执行所需的优化，以最小化公式 5 中的残差。最小化过程可能需要多次尝试，从而为 $\theta_i, i = 1, n$生成多组数值。每次尝试都会为所有实验样本得出一个最小残差。利用包含 $\theta_i, i = 1, n$ 所有拟议设置的平行坐标图，识别出现频率最高的数值。请注意，所构建的代理模型用于执行公式 5 中 $S_i(\boldsymbol{\theta})$ 所需的评估，而不是针对每种情况都进行实际的 MFiX-PIC 模拟。因此，在优化步骤之前，需要通过调整后的 R^2 或交叉验证误差评估等方法，仔细评估代理模型的可信度。这样可以确保尽量减小代理模型引入的误差。

6. 通过在现有模拟活动中重新运行一组选定的模拟，或为未见过的样本构建新的模拟活动，来验证所提出的校准后的模型参数设置。在这两种情况下，都需要根据实验解评估误差，以确定校准设置是否确实提高了仿真模型在目标应用中的可信度。

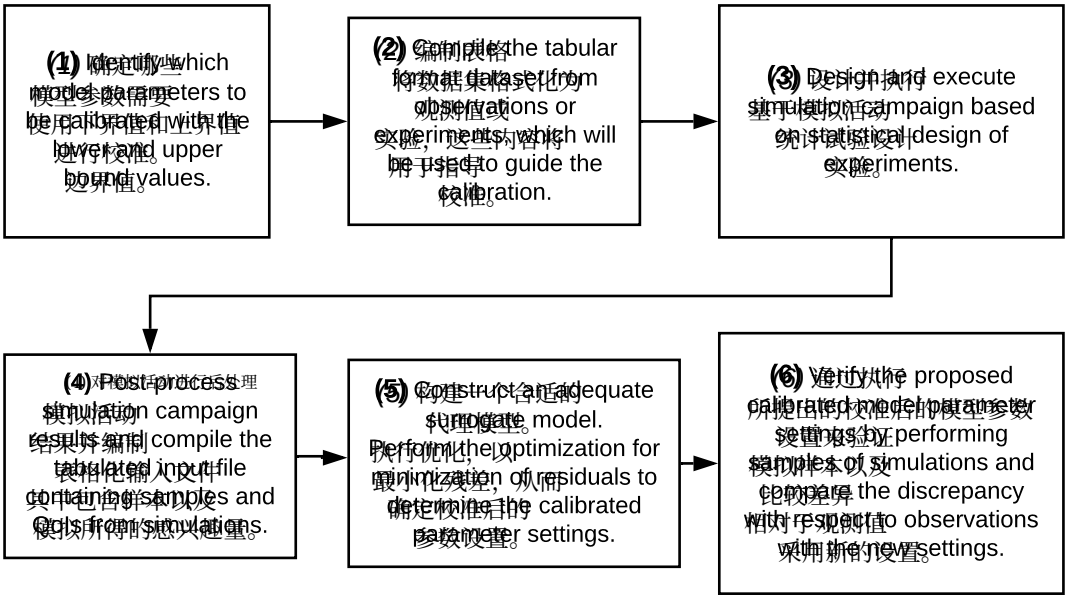

图 3：本研究中执行的确定性校准工作流程示意图。

3.5 贝叶斯（统计）校准

贝叶斯校准与上一节介绍的确定性校准方法有所不同。贝叶斯校准采用贝叶斯定理，该定理通过模型输出的观测结果的似然，将先验信息及其相关不确定性与未来信息联系起来（Muehleisen and Bergerson，2016）。在确定性校准方法中，目标函数是寻找一组不确定模型参数的取值，使实验观测数据与模型计算得出的关注量之间的残差误差最小化。然而，在贝叶斯校准中，目标函数是确定输入参数最可能的不确定性，使得关注量在具有一定不确定性的情况下，其可能取值范围能够最大程度地涵盖观测数据（Muehleisen and Bergerson，2016）。这是一个迭代过程，通过针对目标不确定参数更新概率分布，使其与观测数据保持一致。

贝叶斯校准方法最初由 Kennedy and O'Hagan（2001年）提出，是一种统计框架，其中包含"一个层级模型，将物理系统中的含噪现场测量值与计算机模型在使用任意未受现场控制的校准参数的'真实'（但未知）值运行时产生的可能存在偏差的输出联系起来"（Gramacy et al., 2015年）。该框架的核心是一对相互耦合的高斯过程（GP）先验，分别用于（a）模拟器输出和（b）偏差。对于后者的 GP 模型，该方法考虑了模型预测值与观测值之间的系统性差异，这些差异通常称为"模型误差""模型形式不确定性"或"结构误差"（Maupin 和 Swiler，2020）。模型的层级性质与贝叶斯后验推断相结合，使两种数据来源（模拟数据和现场数据）都能参与所有未知量的联合估计。

贝叶斯校准相较于确定性校准的一项主要优势是"能够全面描述参数的不确定性，并由此描述模拟器输出的不确定性。"（Guillas 等人，2014）。此外，在贝叶斯框架下，能够用"先验"表达关于模型参数的"不确定"科学判断，从而自然地整合科学知识与测量值所提供的证据。（Guillas 等人，2014）。另一方面，贝叶斯校准的一项主要缺点是其校准过程本质上具有迭代性，可能需要大量迭代才能收敛到最可能的后验分布。如果先验分布选择不当，通常就会遇到迭代次数过多的情况，因此校准过程中需要对其进行大量更新（Muehleisen and Bergerson，2016）。因此，谨慎选择先验十分重要，文献中有许多研究专门探讨不同先验对贝叶斯校准的影响。例如，Ling 等人（2014）的研究考察了采用多种不同模型差异函数（模型偏差）先验形式的贝叶斯校准，这些形式从常数到具有非平稳协方差函数的高斯随机过程不等。贝叶斯方法的另一项缺点

是“可辨识性”，即区分不确定的模型输入参数（这是进行校准的主要动机）与系统性不足（模型偏差）的能力，而这往往颇具挑战性（Arendt 等人，2010）。有关这些问题的更多信息，请参阅 Maupin 和 S wiler（2020）、Wang 等人（2021）和 Ling 等人（2014）。

如 Guillas 等人（2014年）所示，贝叶斯校准过程可以：(i) 评估 CFD 模型中较小的系统偏差；(ii) 缩小参数值的范围，从而找出能使 CFD 模型输出与观测值（即本例中的解析解）最匹配的参数值；(iii) 构建一个计算成本低的 CFD 模型统计代理模型（也称模拟器）；以及 (iv) 利用代理模型量化关注量（即沉降激波的位置）的不确定性，这些不确定性既来自 MFiX-PIC 模型参数和数值代码本身（由各种假设和简化导致），也来自测量误差。若不使用代理模型，传播这些不确定性将需要极高的计算成本。

图4高层次地展示了贝叶斯校准框架。该框架以基于当前认知的模型参数先验分布为起点。因此，先验分布的假设会产生影响。随后，利用实验观测值引导校准过程；该过程通过贝叶斯定理估计模型参数的后验分布。采用基于马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）的方法来应用贝叶斯法则。

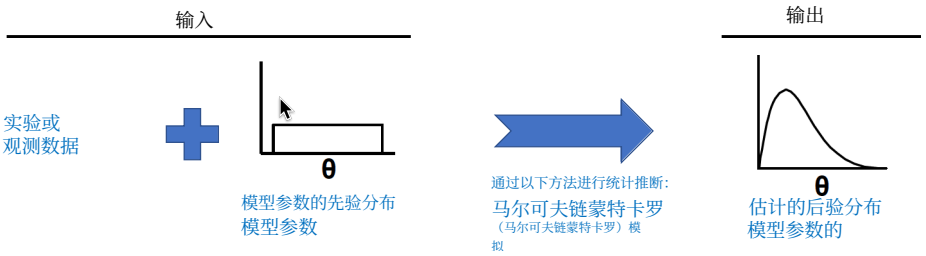

图4：贝叶斯校准示意图（Adams 等人，2015年）。

关于贝叶斯校准方法及其应用的全面文献综述，请参阅 Viana and Subramaniyan（2021）。

本研究遵循 Kennedy and O’Hagan（2001年）提出的原始贝叶斯校准框架。该框架将模型偏差和计算机模型中的关注量表示为高斯过程，以探究如何通过精细调节五个 MFiX-PIC 模型参数，提高沉降激波位置的预测精度。与原始贝叶斯校准框架的一个主要不同之处在于，本研究有观测值可用于指导校准。通常会使用带有一定不确定性的实验数据，而本研究采用了解析解，并引入了人为不确定性（小于 1%），以表征实验不确定性的影响。

按照 Viana and Subramaniyan（2021）的记法，如果假设模拟器（MFiX-PIC）能够充分表示获取观测值的物理系统，那么观测值与模拟器之间的关系可表示为以下方程：

$$y(\mathbf{x}_i, t) = \eta(\mathbf{x}_i, t; \theta) + \delta(\mathbf{x}_i, t) + \epsilon_i \tag{6}$$

其中$\mathbf{x}_i$ 表示输入设置，例如几何形状和可直接测量的变量；（例如，本例中的初始固体浓度，ϵ_{s0}）i 表示 n 个观测值（具有不确定性的实验）中的第 i^{th} 个观测值；t 表示时间相关瞬态问题中的时间；y 表示输出观测值（本例中为用于指导校准的解析解）；$\eta(\mathbf{x}_i,\ t;\ \theta)$ 表示模拟器（本例中为 MFiX-PIC 模拟）；θ 表示无法直接测量的校准参数集合（例如，θ_1：P_0 压力线性缩放因子，θ_5：VelfacCoeff）；$\delta(\mathbf{x}_i,\ t)$ 表示用于解释模拟器与真实情况之间差异的随机项（也称模型形式不确定性或模型偏差），ϵ_i 表示观测值的变异性。

贝叶斯校准从不确定模型参数的先验分布开始，该分布反映了我们对这些参数的信念。随后，利用贝叶斯定理，借助观测值更新对模型参数的初始信念。因此，对于给定的一组观测值和模拟器结果，可以通过求解公式 7 计算模型参数的后验分布，即$\mathbf{z} = [y^T, \eta^T]$（Viana and Subramaniyan，2021）：

$$p(\theta, \mu, \lambda, \beta|\mathbf{z}) = \frac{L(\mathbf{z}|\theta, \mu, \lambda, \boldsymbol{\beta}, \sum) \, p_0(\theta) \, p_0(\mu, \lambda, \boldsymbol{\beta})}{\int L(\mathbf{z}|\theta, \mu, \lambda, \boldsymbol{\beta}, \sum) \, p_0(\theta) \, p_0(\mu, \lambda, \boldsymbol{\beta}) \, d\theta d\mu d\lambda d\beta} \tag{7}$$

其中

$$L(\mathbf{z}|\theta, \mu, \lambda, \boldsymbol{\beta}, \sum) = |\sum|^{-1/2} exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{z}-\mu)^T \sum^{-1} (\mathbf{z}-\mu)\right]$$

$$\sum = \sum_{\eta} + \begin{bmatrix} \sum_y & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

μ，λ，$\boldsymbol{\beta}$是高斯过程模型的超参数；L(。) 是给定这组超参数时观测数据的似然；

p_0 是超参数的先验分布；$\sum$是协方差矩阵（以参数 λ 和 β 定义）

已知上述方程难以求解，通常使用马尔可夫链蒙特卡罗方法进行数值积分（Viana and Subramaniyan，2021），这也是贝叶斯校准计算开销较大的原因之一。求解方程 7 可得到参数 θ、μ、λ 和 β 的联合后验分布。因此，除了估计校准参数 θ 的不确定性外，还可以使用构建的高斯过程模型，对此前未观测过的点（模拟或实验）进行预测。有关上述公式的更多细节，请参阅 Viana and Subramaniyan（2021）的综述论文。

3.5.1 贝叶斯校准工作流程

按照 Muehleisen and Bergerson（2016）提出的框架，贝叶斯校准的一般工作流程可分为三个主要步骤：

1. 根据对不确定模型参数的认识定义先验分布（例如，使用假定的概率密度函数描述 θ_1 到 θ_5 的不确定性；本例中是在规定的上下界内采用均匀分布）。2. 根据设计变量收集实验观测值（例如，本例中改变 x_1：初始浓度，以根据解析解计算沉降激波位置，并以此代替实验）。3. 基于观测数据，反复运用贝叶斯定理校准（假定的）先验参数概率密度函数，直至迭代收敛至可接受的程度（Kennedy and O'Hagan，2001）；由此得到所校准模型参数的估计后验分布（即 θ_1 到 θ_5）。

由于上述工作流程的计算复杂度较高且资源需求大，本研究采用了一种开源不确定性量化工具包，可部分自动化执行上述步骤。下一节将概述具备贝叶斯校准功能的不确定性量化工具包。

3.6 所采用的软件工具箱

有多种开源不确定性量化软件可用于本报告所述的校准研究，例如 PSUADE（Tong，2010年；2020）、DAKOTA（Adams，2008年；Adams 等人，2009年）等。在此前的报告（Gel 等人，2021）中，针对确定性校准研究，除 NETL 开发的工具 Nodeworks（Weber 等人，2020）外，还使用了 PSUADE 和 DAKOTA。然而，在这三种软件中，只有 PSUADE 和 DAKOTA 支持贝叶斯校准。后者需要更复杂的配置，并且在贝叶斯校准过程中同时构建代理模型时还遇到了若干问题。因此，作者决定在本次贝叶斯校准研究中仅使用 PSUADE，并将结果与基于 PSUADE 的确定性校准结果进行比较。本节将简要介绍 PSUADE 软件工具。

3.6.1 PSUADE：

PSUADE 是由劳伦斯利弗莫尔国家实验室开发的开源不确定性量化软件工具包（Tong，2010年），自 2007 年起以 LGPL 许可证发布。该软件的名称 PSUADE 源自以下缩写：

不确定性分析与设计探索问题求解环境。该程序支持多种非侵入式不确定性量化分析方法，可将模拟应用视为“黑盒”代码。因此，许多不确定性量化分析任务可以直接通过对黑盒进行抽样，或通过根据计算模型构建的数据拟合代理模型来完成。该软件提供了多种抽样方法，使用户能够开展模拟活动，目标是构建合适的数据拟合代理模型（又称响应面模型、元模型）。用户既可以进行不确定性正向传播等基础不确定性分析，也可以开展偶然-认知不确定性分析等更复杂的分析。PSUADE 内置统计校准功能（即使用马尔可夫链蒙特卡罗进行贝叶斯校准）。然而，确定性校准需要用户编写辅助代码来整合残差评估。PSUADE 以 C++ 编写，主要以命令行软件的形式运行，因此可能需要一定的学习时间。有关 PSUADE 功能的更多详情，请访问该软件的网站（Tong，2020）。

4 校准演示案例

4.1 所考虑演示案例概述

本报告延续了此前记录一系列校准研究的工作，这些研究旨在考察涵盖广泛流动状态的三种工业应用。具体而言，关注的案例包括颗粒沉降、流化床和循环流化床。第一份报告（Gel等，2021）聚焦于确定性校准背景下的颗粒沉降问题。本报告旨在通过展示贝叶斯校准（又称统计校准）在同一问题中的应用，并比较两种方法所取得的改进，补充此前的工作。此外，第一份报告（Gel等，2021）发表后，研究人员在 MFiX-PIC 中发现了一个错误，经确认该错误会影响此前报告的确定性校准结果。本文还给出了更新后的确定性校准研究结果，并将其用于与贝叶斯校准结果进行比较。

确定性校准研究的目标是针对给定的应用问题，获得一组最优模型参数。类似地，贝叶斯校准的目标是根据可获得的实验数据，估计所推断出的不确定模型参数的可能分布，而不是像确定性校准那样得到参数的标量值。最终，本报告作者旨在提供所提出的 MFiX-PIC 设置的贝叶斯校准结果，并将其与确定性校准结果进行比较，以评估哪种校准方法对提高 MFiX-PIC 在此类流动问题中的准确性更为有效。

4.2 重力作用下的颗粒沉降

重力作用下颗粒在高密度介质中的沉降适合用于校准，因为其感兴趣量（QoI）具有解析解（例如充填激波的位置）。这消除了与实验测量值相关的不确定性。此外，感兴趣量具有代数形式，因此可以轻松生成额外数据。设置和运行条件遵循 Vaidheeswaran 等（2020c）的研究，如图5所示。计算域在 x、y 和 z 方向上分别为 0.02 m $\times$ 1 m $\times$ 0.02 m。模拟在各抽样位置运行，持续时间为 1 秒，采用恒定时间步长 5e-4 s。

模拟开始后，会出现两个浓度（运动学）激波并不断演化。第一个激波源自颗粒床层顶部，对应于沉降；另一个源自容器底部，对应于充填激波。本研究所考察的感兴趣量是充填激波的位置（y_2）。其解析解如下：

$$y_2(t) = -t\left(\frac{\epsilon_s^*\epsilon_g^* u_r^* - \epsilon_{s0}\epsilon_{g0}u_{r0}}{\epsilon_s^* - \epsilon_{s0}}\right) \tag{8}$$

其中，ϵ_s^* 和 ϵ_g^* 分别表示紧密堆积条件下固相和气相的体积分数。ϵ_{s0} 和ϵ_{g0} 表示初始体积分数。u_{r0} 和 u_r^* 分别表示根据初始条件和紧密堆积条件计算得到的相对速度。这种特定情况类似于颗粒包具有相对较慢的动力学特性，例如循环流化床的立管或移动床反应器中观察到的情况。验证与确认手册（Vaidheeswaran 等，2020c）采用此案例对比 MFiX-DEM、MFiX-PIC 和 MFiX-TFM 的结果，如图 6 所示。

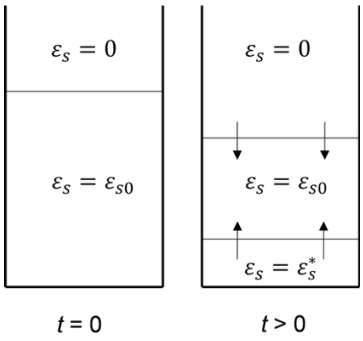

图5：颗粒在高密度介质中沉降的示意图。

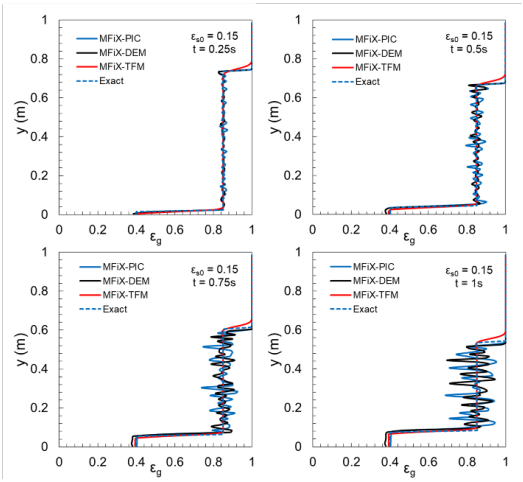

图6：使用未经校准的 MFiX-DEM、MFiX-PIC 和 MFiX-TFM 模拟获得的冲击波前沿随时间演变情况与解析解的比较。

4.3 模拟活动与代理模型

设计并执行了多个模拟活动，以创建能够充分表征输入参数与 MFiX-PIC 中关注量之间关系的数据拟合代理模型。下面简要描述了本次校准研究所用的模拟活动：

- **模拟活动 #1：**主要针对确定性校准研究。在初始校准研究中，采用了一项包含 120 次 MFiX-PIC 模拟的模拟活动。该样本量是通常公认的指导标准（每个不确定参数取 10 个样本）的两倍。增加样本的目的是更好地捕捉输入参数与感兴趣量之间的关系。然而，在初始校准研究结果发表后，研究人员发现了 MFiX-PIC 中的一个错误修复问题（Gel等，2021）。该错误修复使 ROP_g（气体密度与气体体积分数的乘积）的计算与 EP_g（气体体积分数）保持一致，从而使这两个变量的更新同步进行（MFiX，2021）。然而，该错误修复影响了我们先前模拟活动的结果，而这些模拟活动曾用于构建 Gel 等（2021）中生成的代理模型，因此必须重新运行。在重新运行原始的 120 个样本模拟活动后，研究人员认为有必要对上下界进行若干修订，这促使他们重新设计一项模拟活动。根据从先前模拟活动中获得的经验，研究人员构建了一项样本量为原始样本量一半的新模拟活动，以检验在获得相似代理模型质量的情况下，能否缩减模拟活动的规模。因此，该模拟活动的总样本量为 60 个，而非 120 个。结果表明，这一规模足以构建质量合格的数据拟合代理模型，能够满足特定问题配置下确定性校准研究的需求。正如先前报告中所提到的，样本量

是构建的数据拟合代理模型质量中的重要参数之一。然而，计划开展一项类似于原报告（Gel等，2021）中所述研究的独立研究，以评估基于60个样本与120个样本构建的代理模型对确定性校准结果的敏感性。

- **模拟活动 # 2：** 针对贝叶斯校准研究，初始采样次数为 120 次，之后又增加了 64 个样本。

随后，使用根据模拟活动结果构建的代理模型代替实际的 MFiX-PIC 模拟，以便在校准研究中以更低的成本评估所需的关注量。所构建代理模型的质量至关重要，因为其对关注量的评估结果必须尽可能接近 MFiX-PIC 模拟结果。

4.3.1 模拟活动#1

采样模拟设计： 关于采样模拟活动设计流程的详细描述，已在之前的确定性校准研究中提供（Gel等，2021）。按照相同的方法，已使用正交拉丁超立方采样方法为六个 MFiX-PIC 输入参数生成模拟活动。前五个是 MFiX-PIC 专属的建模参数，用户可通过关键字访问。这些参数包括： θ_1： 压力线性缩放因子（P_0）； θ_2： 体积分数指数缩放因子（β）； θ_3： 统计权重（W_p）； θ_4： 最大密堆积时的空隙率（ϵ_g^*）； 以及 θ_5： 固体滑移速度缩放因子（α）。第六个参数是初始固体浓度，这是一个通用输入参数，用于指定 MFiX 中的初始条件，与模型无关。在本报告的其余部分中，由于绘图软件中的字体问题，可能会使用输入参数名称的缩写。表1列出了这些缩写，以及模拟活动中每个模型参数所假定的下界值和上界值。例如，在本报告中，凡是出现 t1:P_0 or t1 或 Theta1 的地方，均等同于 θ_1：压力线性缩放因子（P_0）。

符号	描述	Min.	Max.
θ_1 or t1:P_0	压力线性缩放因子（P_0）	0.488	19.99
θ_2 or t2:beta	体积分数指数缩放因子（β）	2.0	5.0
θ_3 或 t3:统计权重	统计权重，(W_p)	3.0	15.0
θ_4 or t4:ep_g*	最大密堆积时的空隙率（ϵ_g^*）	0.38	0.43
θ_5 or t5:VelfacCoeff	固体滑移速度缩放因子，(α)	0.5	0.9
x_1	初始固体浓度（ϵ_{s0}）	0.05	0.25

表1：输入 参数缩写、描述，以及模拟中所考虑的上下界值 n
活动# 1，共60个 样本。

从模拟活动结果中获取的初始关注量集合（又称响应变量）包括y_1：沉降激波位置； y_2：充填激波位置；以及 y_3：实验容器底部最近单元中的空隙率。本文所述工作的范围是分析MFiX-PIC在高颗粒浓度区域中的性能。因此，为与确定性校准研究保持一致，本分析仅使用 y_2 。所以，仅将 y_2：充填激波位置视为校准所需的关键关注量。请注意，在本报告的其余部分，由于绘图软件中的字体问题，可能会使用该关注量名称的缩写形式，例如“y2:LocSettling”，它对应于 y_2： 充填前沿或激波位置。

图 7 展示了从模拟活动中提取的所有输入参数与所有输出变量（即关注量）的散点矩阵图。虽然散点矩阵图显示提取了三个关注量（即 y_1：沉降位置、 y_2：填充冲击位置、 y_3：实验容器底部最近的第一个单元中的空隙率），但当前校准研究的重点仅在于 y_2：填充冲击位置。散点矩阵图中对应的行以红色矩形框突出显示。此类图像可用于快速直观地评估明显的相关性。例如，图 7 显示，初始浓度（$x1$，横轴）与沉降激波位置（$y1$，纵轴）之间存在很强的线性相关性；这一判断是通过将表示（$x1$ 与 $y1$）的区块作为独立图表进行检查，并注意到变量之间大致呈线性对应关系得出的。

4.3.2 代理模型构建：

工作流程的下一步是根据模拟活动结果构建代理模型，以替代 MFiX-PIC 模拟，从而在进行不确定性量化分析或敏感性分析时，以较低成本评估关注量。

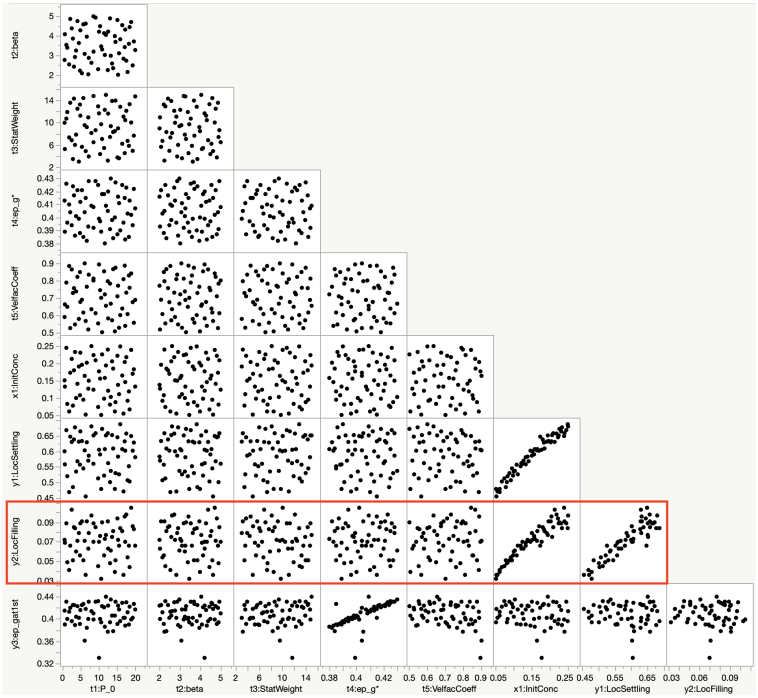

图7：模拟活动 #1 中使用 OLH 抽样（60 个样本）所采用的所有输入参数和所有感兴趣量的散点矩阵图。请注意，研究中仅使用红色矩形框标出的行作为关注量（即 y2:LocSettling）。

为此，在构建过程中评估了多种代理模型类型，例如多元自适应回归样条（MARS）、线性回归和高斯过程模型（GPM）。目标是找到最适合数据的代理模型，以刻画给定输入参数与模拟活动中的关注量之间的关系。

最终，采用 PSUADE 中 Tong 实现的 GPM（Tong，2010年；2020）并使用 RSM 选项 10 的高斯过程模型，依据未缩放的均方根误差，表现出最佳拟合效果之一。PSUADE 计算得出的数据拟合代理模型均方根误差为 5.188e-03。图8展示了使用 PSUADE 得出的交叉验证误差评估结果。右侧的一致性图将实际 MFiX-PIC 模拟结果（横轴标注为“样本输出”）与代理模型的预测值（纵轴标注为“预测输出”）进行比较。理想情况下，样本点（以蓝色星号表示）应沿着穿过一致性图的 45。 直线分布。偏离对角线的程度揭示了模拟与数据拟合代理模型之间的差异，这意味着使用代理模型代替相应的 MFiX-PIC 模拟时会引入额外的不确定性。为更好地说明模拟与数据拟合代理模型之间的误差，左侧的直方图展示了偏离对角线的分布情况。理想的误差分布应以零为中心，分布范围较窄，且尾部没有偏斜。PSUADE 数据拟合代理模型的输入文件见附录 A。

4.3.3 模拟活动#2

采样模拟设计：模拟活动 # 2 的步骤与第一次活动类似，但最初的活动设计包含 120 次采样模拟。然而，参数空间边界处缺乏足够的样本，导致多个校准后模型参数的后验分布在上下界处均出现峰值。这可能表明代理模型在参数输入空间边缘附近存在较大误差。为解决这一问题，我们在基于 OLH 采样的 120 个样本基础上，增加了基于因子设计的 64 个样本，以便更准确地捕捉参数空间边界内感兴趣量的变化情况。另需说明的是，贝叶斯校准研究启动时，模拟活动 #1 所用的基于 60 个样本的模拟活动尚不可用。因此，采用了基于 120 个样本的活动。不过，计划另行开展一项研究，以检验上述问题是否也会出现（即后验分布在参数空间边界处

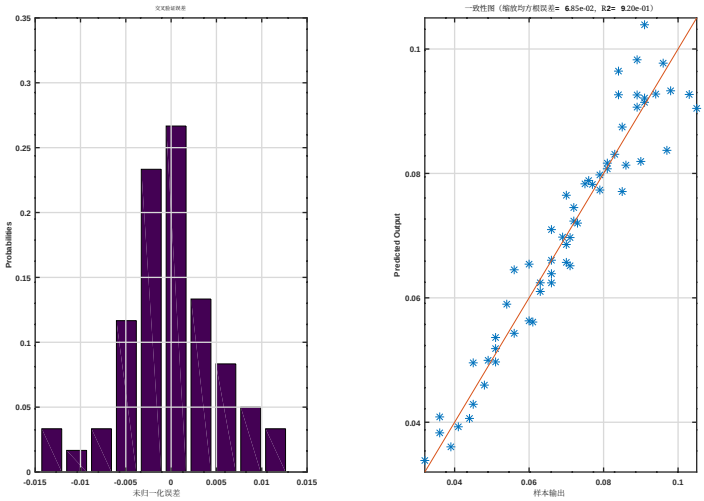

图8：通过交叉验证误差评估代理模型的质量（基于60个样本）。

达到峰值）。我们为 60 个样本的试验创建了一组新样本；由于参数空间边界附近的样本数量充足，这组样本可能不会遇到此前观察到的同类问题。

表2列出了五个模型参数和一个物理变量的上下界。由于初始样本以无量纲方式生成（即范围设为0到1）后，再映射到实际参数的上下界，因此这些界限可能与表1中所示的略有不同。拉丁超立方体抽样无法确保样本恰好取到所需的界限值，因此，有时最好将界限略微扩展，以确保至少存在一个取到目标界限值的样本。

符号	描述	Min.	Max.
θ_1 或 t1:P_0	压力线性缩放因子，(P_0)	0.488	20.0
θ_2 or t2:beta	体积分数指数缩放因子，(β)	2.0	5.0
θ_3 or t3:统计权重	统计权重，(W_p)	2.95	15.0
θ_4 or t4:ep_g*	最大密堆积时的空隙率，(ϵ_g^*)	0.38	0.4299
θ_5 或 t5:VelfacCoeff	固体滑移速度缩放因子，(α)	0.5	0.899
x_1	初始固体浓度，(ϵ_{s0})	0.05	0.2498

表2：模拟活动 # 2 中考虑的输入参数缩写、描述及上下界值列表，使用了 120+64 个样本。

与图7类似，图9展示了模拟活动 # 2 中样本的散点矩阵图（仅120个样本）。

同样，在区块（$t4$ 与 $y3$）、（$x1$ 与 $y1$）以及（$x1$ 与 $y2$）中可以看到类似的、近似线性的对应关系。

这种定性可视化也有助于识别关注量中的明显离群值。如图 9 所示，可以借助可视化定性识别离群值，因为这些数据点会与其他大多数数据点相距较远，例如样本 # 118，该样本在图 10 中以黑色圆圈突出显示。离群值可能由未收敛的模拟或导致关注量结果极端的特殊输入设置引起。因此，建议调查类似离群值的结果的根本原因，并在有充分理由时将其剔除，因为离群样本会对代理模型的质量产生不利影响。就本例而言，经过进一步调查，确认样本 # 118 并非离群值。

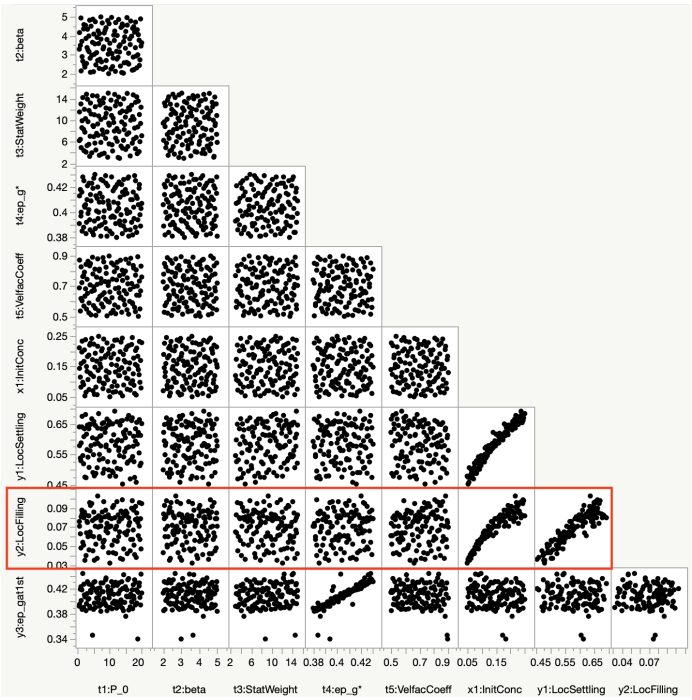

图 9：使用 OLH 抽样（120 个样本）进行模拟活动时所用的所有输入参数和所有反演输出变量的散点矩阵图。请注意，研究中仅使用红色矩形标出的行来表示关注量（即 y2:LocSettling）。

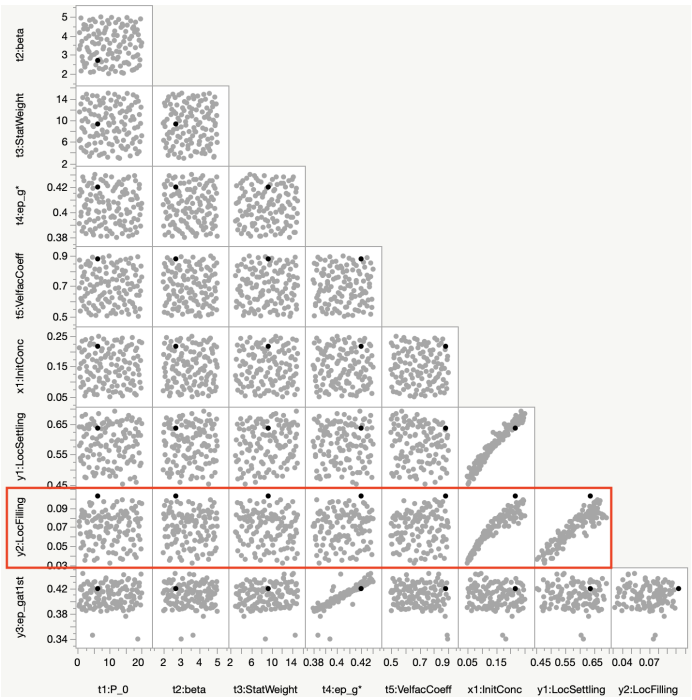

图 10：使用 OLH 设计基准（120 个样本）进行模拟活动时所用的所有输入参数和关注量的散点矩阵图，其中以黑色标出了 y2:LocSettling 的一个潜在离群样本示例（样本 # 118）。

初始模拟活动包含 120 个样本，随后基于析因抽样增加了 64 个样本，以确保边界边缘上有足够的样本。拉丁超立方等抽样方法力求满足空间填充特性，但无法保证在待探索参数空间的边界上有足够的样本。因此，为解决这一问题，采用了增补抽样。图11显示了在原始模拟活动基础上增加的 64 个样本（以黑色实心圆突出显示）。为简洁起见，除输入参数外，本图仅展示选定的关注量（即 y_2：充填激波位置）。在使用 120 个样本构建代理模型后，发现有必要增加样本，以增补最初的 120 个样本。

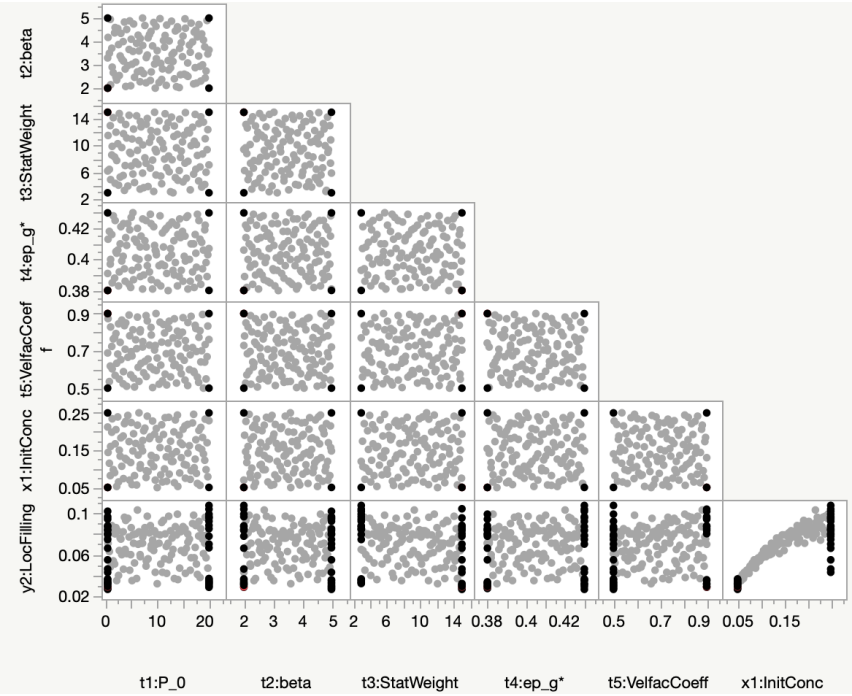

图11：用于使用全部 184 个样本构建代理模型的所有输入参数和选定关注量的散点矩阵图，其中新增样本以黑色圆圈显示。

4.3.4 代理模型构建：

工作流程的下一步是根据模拟活动结果构建代理模型。进行贝叶斯校准研究时，该模型将代替 MFiX-PIC 模拟，以更低的成本评估关注量。由于基于 GPM 的代理模型能够自然地表示不确定性，因此更受青睐。因此，本文使用了 PSUADE 中的 GPM 代理模型（选项 10）。

与模拟活动 #1 中代理模型质量评估（图8）类似，图12展示了根据模拟活动 # 2 的结果构建的代理模型的交叉验证误差评估结果。右侧的一致性图比较了实际的 MFiX-PIC 模拟结果（横轴标注为“样本输出”）与代理模型的预测值（纵轴标注为“预测输出”）。理想情况下，样本点（以蓝色星号表示）应沿着一致性图中的一条 $45°$ 直线分布。任何偏离对角线的情况都表明模拟与数据拟合代理模型之间存在差异，这意味着使用代理模型代替相应的 MFiX-PIC 模拟时会引入额外的不确定性。为了更清楚地展示模拟与数据拟合代理模型之间的误差，左侧的直方图显示了偏离对角线的分布情况。理想的误差分布应以零为中心，分布范围较窄，且尾部不偏斜。

4.3.5 全局敏感性分析：

在校准研究之前，使用上一节构建的代理模型进行了全局敏感性分析，以便在 PSUADE不确定性量化工具包中为 Sobol 指数方法执行必要的感兴趣量评估。

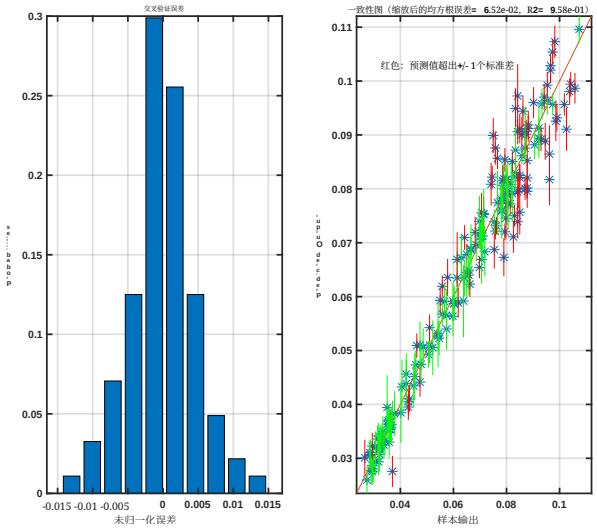

图12：通过交叉验证误差评估代理模型的质量（基于 184 个样本）。

更好地了解影响最大的输入参数。除了五个模型参数外，敏感性分析还考虑了一个物理设计变量x_1：初始浓度。为简洁起见，鉴于样本规模较大，敏感性分析仅采用模拟活动#2的结果；预计这些结果能更好地反映给定输入和输出下 MFiX-PIC 的行为。

图 13 展示了 Sobol' 总敏感性分析结果，旨在定量识别对关注量 y_2：填充冲击位置影响最大的参数。需要注意的是，总指数同时考虑了主效应（例如 $t1$、$t2$、$t3$、$t4$、$t5$ 等）及其对关注量的交互效应。对于包含 184 个样本的扩充仿真活动结果（即在原有 120 个样本的模拟活动基础上增加 64 个样本），x_1：初始浓度对 y_2 的影响最为显著。影响第二大和第三大的模型输入参数分别为 $t5$：VelfacCoeff 和 $t3$：Stat Weight。绿色符号表示每个参数通过 300 次样本自助法得到的置信区间。对于任何估算的 Sobol' 指数，置信区间均未显示出显著变异性。

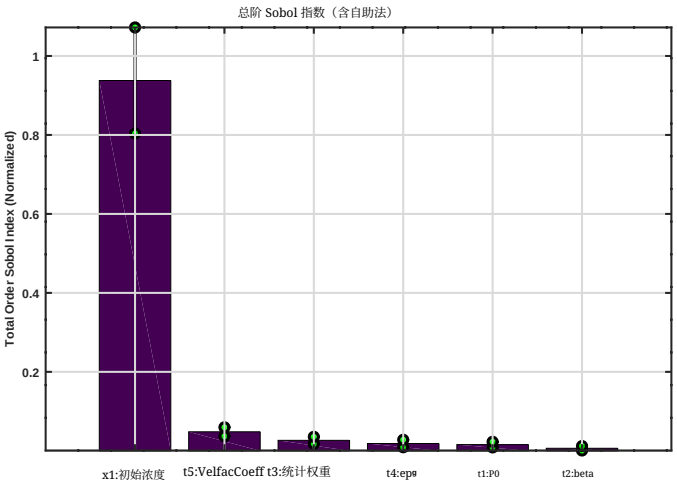

图13：利用基于 184 个样本（模拟活动 # 2）数据集构建的代理模型，得到的全局敏感性分析结果。

4.3.6 使用 PSUADEUQToolkit 进行确定性校准：

Gel 等（2021）已详细讨论 PSUADE 不确定性量化工具包中的“确定性校准”方法。此处为提醒读者相关流程，并在讨论贝叶斯校准之前，进行类似的讨论。表 3 展示了确定性校准程序结束时得到的五个建模参数的一组拟议设置。请注意，该流程包含确定性优化，用于求出使方程 5 中所示残差最小化的 $\boldsymbol{\theta}$： $\{\theta_1 \ldots \theta_5\}$ 的取值。

可采用多种优化技术来求解残差最小化问题。在本例中，使用构建的数据拟合代理模型来计算 $S_i(\boldsymbol{\theta},\ \boldsymbol{x})$ 项，而不运行 MFiX-PIC 模拟。

表 3 所示的确定性校准结果，是使用 PSUADE 不确定性量化软件（Tong，2010年）通过以下步骤，基于模拟活动 # 1 数据集获得的：

1. 对模拟活动结果进行后处理，并将其导入 PSUADE 可读取的格式，即包含表格数据的标准 ASCII 文本文件，其中每列代表所考虑的输入参数和关注量。本例采用了六列输入参数（$\theta_1 \ldots \theta_5$ 和 x_1）以及一列关注量（$y2$： 填充冲击位置）。为便于格式化，文件首行标明样本总数、输入参数总数和关注量总数。2. 在 PSUADE 中构建数据拟合代理模型，以表征输入参数与关注量之间的关系，从而在优化过程中快速进行所需的函数评估。为尽量降低代理模型相关不确定性的影响，可采用交叉验证误差评估和其他统计度量来检验所构建代理模型是否适用；若采用基于多项式回归的代理模型，还可使用 R^2。目标是为给定数据集找到最合适的数据拟合代理模型。3. 将构建的代理模型导出并编译为独立可执行代码（PSUADE 提供 C 和 Python 两种选项）。随后可使用该可执行代码执行函数评估；传入 $\theta_1 \ldots \theta_5$ 的设置后，将返回标量形式的关注量。

4. 修改导出的代理模型的 C 代码。进行此项修改的原因是，导出的 C 代码旨在执行函数评估，即接受输入并计算关注量（即填充冲击位置）作为输出。然而，确定性校准中使用的优化流程旨在寻找一组使残差最小化的模型参数。这意味着需要修改导出的代理模型代码，使其不仅能评估关注量，还能通过计算所得值 $(S_i(\boldsymbol{\theta},\ \boldsymbol{x}))$ 与相应实验的关注量 (y_i) 之差来计算残差（公式 5）。如果不进行此项修改，优化将针对错误的目标函数进行。

5. 在 PSUADE 中使用基于二次近似的有界优化（BOBYQA）优化器执行优化，找出能使残差最小的一组 $\theta_1 \ldots \theta_5$ 值。为探索所有可能的解，执行 10 或 15 次优化，然后评估各次试验中最常见的拟议设置。

表 3 显示了确定性校准研究得出的五个模型参数的拟议设置。如前所述，实验结果（在本例中为解析解）用于指导校准研究。分别基于 11 个和 21 个解析解样本得到了两组结果。如前所述，由于在 MFiX 21.2 版（MFiX，2021）中发现并修复了 MFiX-PIC 的一个错误，表 3 中的数值与此前发表的关于使用 MFiX-PIC 对沉降床进行确定性校准的数据（Gel等，2021）不一致。具体而言，在先前的模拟中，PIC 建模程序内部使用的气体密度数值不一致。此错误已修复，因此必须重新开展模拟活动，从而得到了通过确定性校准确定的建模参数的一组新拟议值。

4.3.7 使用 PSUADEUQ 工具包进行贝叶斯校准：

上一节介绍的工作流程的前几个步骤同样适用于贝叶斯校准。因此，需要设计并开展模拟活动，以创建数据拟合代理模型所需的数据集，使该模型能够“充分”刻画输入参数与关注量之间的关系。处理模拟活动结果并构建训练数据集后，将采用基于高斯过程的数据拟合代理模型。在确定性校准中，我们评估了各种代理模型选项，以确定最佳的数据拟合代理模型。在贝叶斯校准中，通常更倾向于采用高斯过程模型，因为它还能提供所引入代理模型的不确定性估计。

确定性校准拟议设置	t1 压力线性刻度因子	t2 体积分数指数比例因子	t3 统计的权重	t4 体积分数达到最大值填充	t5 固体滑移速度因子
使用 11 分析的解决方案	1.7	2.39	10.755	0.42	0.43
使用 21 解析式解答	7.86	2.28	6.03	0.38	0.626

表 3：通过使用 11 个与 21 个解析解样本指导校准所获得的确定性校准建模参数拟议设置。

表4中展示的贝叶斯校准结果是通过以下步骤使用 PSUADE 不确定性量化软件（Tong，2010年）获得的：

1. 将模拟活动结果后处理并导入 PSUADE 可读取的格式，即包含表格数据的标准 ASCII 文本文件，其中每一列分别表示所考虑的输入参数和关注量。对于本案例，使用了 6 列输入（$\theta_1 \dots \theta_5$ 和 x_1）以及 1 列关注量（$y2$：填充冲击位置）。为便于格式化，文件第一行表示样本总数、输入参数总数和关注量总数。
2. 在 PSUADE 中构建数据拟合代理模型，以表征输入参数与关注量之间的关系，该模型随后将用于在优化过程中进行所需的快速函数评估。在此步骤中，采用基于 GPM 的代理模型，因为它们为贝叶斯校准提供了若干额外特性，例如所构建代理模型的不确定性。为尽量减小代理模型相关不确定性的影响，应通过交叉验证误差评估来检验所构建代理模型的适用性。目标是确保利用现有训练数据集能够构建出适用的数据拟合代理模型。如有必要，可以开展额外的采样模拟，以扩充现有模拟活动，从而更好地构建数据拟合代理模型。
3. 选择基于响应面的 MCMC 模拟方法，计算模型参数后验分布的估计值。PSUADE 提供两种选项：1. Gibbs，速度较慢，但可能更准确；2. 蛮力法，速度较快，但准确度受样本量限制。此外，PSUADE 还需要设置若干其他选项，作为本任务的一部分进行确定，例如是否纳入代理模型不确定性，以及是否进行模型差异评估。还需要设置 MCMC 模拟的若干参数，例如 MCMC 链的数量、最大推断样本量、用于构建提议分布的样本量等。MCMC 模拟的计算开销相当大，且需要使用高级算法，因此必须仔细考虑并正确设置。更多详情请参阅 PSUADE 文档（Tong，2010年）。

4. 使用 PSUADE 输出结果以及 Matlab 生成的 matlabmcmc2.m 文件，评估成功完成 MCMC 后得到的模拟结果。图 14 展示了 MCMC 结束时生成的图形输出；当使用 11 个解析解样本指导校准时，该输出会保存在 matlabmcmc2.m 中。图的下半部分显示先验联合分布（蓝色三角区域内的直方图），上半部分显示 MCMC 结束时生成的后验联合分布（红色三角区域内的直方图）。对角线上的直方图显示边缘化后验分布，用于确定拟议设置。

表4显示了贝叶斯校准研究得出的五个模型参数的拟议设置。如前所述，实验结果（此处为解析解）用于指导校准研究。根据11个和21个解析解样本，分别得到了两组结果。比较表4中各模型输入参数的拟议设置实际值，可以清楚地看出，解析解的样本量似乎没有显著影响，因为两种情况下的拟议设置相对相似。

确定性与贝叶斯校准研究拟议设置汇总：表5汇总了确定性校准（从左数第四列和第五列）和贝叶斯校准（第六列和...的拟议设置。

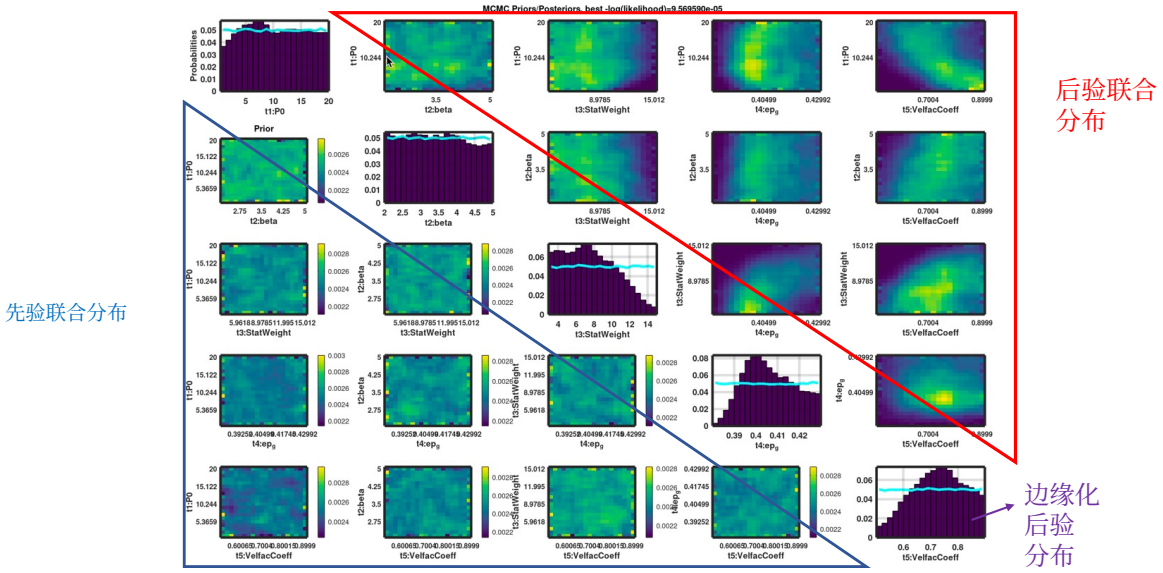

图 14：生成的先验分布和后验分布。

贝叶斯校准拟议设置	t1 压力线性刻度因子	t2 体积分数指数比例因子	t3 统计的权重	t4 体积分数达到最大值堆积密度	t5 固体滑移速度因子
使用 11 个解析解解	10.94	3.49	8.96	0.41	0.69
使用 21 个解析解解	10.26	3.53	8.86	0.40	0.70

表4：通过贝叶斯校准获得的建模参数拟议设置，校准过程中分别使用 11 个和 21 个解析解样本作为指导。

第七列展示了校准研究结果，此外还列出了默认设置（第二列）和基于 V&V 手册的拟议设置（第三列），用于同一问题。每项校准研究均展示了两种不同的拟议设置，分别对应 11 个和 21 个解析解样本。如前所述，使用解析解指导校准研究，以替代实际实验。为评估可用于指导校准的样本数量对结果的影响，我们进行了两种情况的研究：（i）使用 11 个解析解样本（显示在标题为“PS_Exp_n11”的列下）；（ii）使用 21 个解析解样本（显示在标题为“PS_Exp_n21”的列下）。

在所进行的比较中，默认设置（表 5 第二列）由开发人员根据用户经验和一些基于先前文献的设置确定。事实上，本研究的主要动机之一是验证这些数值是否足以模拟工业应用中所见的广泛流动动力学。同样，也采用了 V&V 手册（Vaidheeswaran 等，2020c）中的设置。

验证采用拟议校准设置所实现的精度改进： 在通过确定性和贝叶斯校准研究获得五个模型参数的一组拟议设置后，下一步是评估拟议设置能够为感兴趣量带来的精度改进。需要注意的是，拟议的校准模型参数可能涉及许多不确定性来源。这些不确定性源于通过代理模型传播的模型误差（包括引入代理模型而非实际 MFiX-PIC 模拟所带来的建模假设、简化和近似）以及作为输入提供的数据。对于本案例，由于比较数据集由解析解提供，因此不存在实验误差；但一般情况下并非如此，在验证过程中始终应保持谨慎。

			确定性校准		贝叶斯校准	
MFiX-PIC 模型参数	默认值设置	V&V 手册设置	PS Exp_n11	PS Exp_n21	PS Exp_n11	PS Exp_n21
Theta1（θ_1）：压力线性比例因子	100	10	1.7	7.86	10.94	10.26
Theta2（θ_2）：体积分数分数指数尺度因子	3.0	3.0	2.39	2.28	3.49	3.53
Theta3（θ_3）：统计权重	5.0	5.0	10.755	6.03	8.96	8.86
Theta4（θ_4）：卷。最大值处的分数우우우最大堆积密度	0.42	0.4	0.42	0.38	0.41	0.40
Theta5 (θ_5): 固体滑移速度因子	1.0	0.5	0.63	0.626	0.69	0.70

表5：基于 PSUADE 的拟议校准模型参数与默认设置和 V&V 手册拟议设置的比较。

为了评估拟议校准设置的有效性，采用了基于 119 个新样本的严格评估。新样本根据第五个设计变量（即 $x1$：初始浓度设置）生成，范围为 0.05 至 0.25，并经过检查以确保它们是完全未见过的样本，即先前用于构建代理模型的 120 个样本模拟活动中未使用相同的 $x1$ 设置。因此，针对以下概述的每种情景，均基于这 119 个 $x1$ 样本，使用拟议的校准模型设置开展了新的模拟活动，并将其作为 MFiX-PIC 的输入。随后，将从模拟结果中得到的关注量与使用公式 9 针对这 119 个对应样本分别获得的解析解进行比较。

$$\% \text{ Relative Error} = \frac{(\text{Simulation} - \text{Analytical Solution})}{\text{Analytical Solution}} \tag{9}$$

表6是表5的扩展版本，其中新增了三行，用于评估拟议设置的准确性并对其进行相互比较。表中的最后三行显示了119个样本的平均相对误差百分比，这些数据来自未见过的验证运行。对于每组拟议设置，将119个样本中每个样本计算得到的相对误差百分比取平均值，得到平均相对误差百分比，以便进行比较。同时还报告了相对误差百分比的最大值和最小值。根据报告的相对误差百分比结果，可以观察到一个共同现象：所有结果均持续表现为低估，但不同研究之间的低估程度有所不同。

			确定性校准		贝叶斯校准	
MFIX-PIC 模型参数	默认值设置	V&V 手册设置	PS Exp_n11	PS Exp_n21	PS Exp_n11	PS Exp_n21
Theta1 (θ_1): 压力线性比例因子	100	10	1.7	7.86	10.94	10.26
Theta2 (θ_2)：体积分数指数尺度因子	3.0	3.0	2.39	2.28	3.49	3.53
Theta3 (θ_3)：统计权重	5.0	5.0	10.755	6.03	8.96	8.86
Theta4 (θ_4)：卷。最大堆积时的率	0.42	0.4	0.42	0.38	0.41	0.40
Theta5 (θ_5): 固体滑移速度因子	1.0	0.5	0.63	0.626	0.69	0.70
平均相对误差百分比	-6.61%	-2.25%	-1.44%	-1.94%	-0.64%	-0.30%
最小相对误差	-19.95%	-12.53%	-12.15%	-9.75%	-10.57%	-13.89%
最大百分比相对误差	37.82%	12.16%	12.03%	7.09%	10.72%	12.00%

表6：比较根据拟议校准模型参数（基于 PSUADE）计算的相对误差百分比、默认设置和 V&V 手册建议的设置。

从表6所示结果可以看出，考虑报告的平均相对误差百分比时（红色矩形标出的行），与MFiX-PIC中使用的默认设置相比，两项校准研究都显著提高了MFiX-PIC预测的准确性。具体而言，贝叶斯校准将平均相对误差百分比从-6.6%降低至-0.3%（即使用21个解析解样本进行校准），误差改善幅度接近20倍。与默认设置相比，确定性校准结果也显示误差降低了约四倍。第三列显示的是基于V&V手册的拟议设置，这是Vaidheeswaran 等（2020c）通过试错法开展并记录的校准研究。与V&V手册拟议设置相比，平均相对误差百分比的改善幅度似乎较小（即确定性校准为-2.25%对-1.44%），但仍然十分显著，尤其是贝叶斯校准研究的结果（即-2.25%对-0.3%）。

尽管表6中报告的相对误差百分比的平均值和最大/最小值有助于进行比较，但我们也研究了这些误差的分布情况。图15展示了直方图，分别呈现确定性校准、贝叶斯校准所提出的各组模型参数设置，以及默认设置在验证运行中基于119个未见样本计算得到的相对误差百分比分布。理想情况下，采样模拟产生的所有误差都应以0.0%为中心，并在每个直方图中的红色水平线附近呈较窄的分布。蓝色水平线表示验证过程中每组拟议模型参数所用的全部119次模拟所得相对误差百分比的平均值。因此，蓝线越接近红线越好。最左侧的直方图显示使用默认设置时的相对误差百分比。相对误差百分比的平均值为-6.6%，表明预测值低于红色水平线。左起第二个直方图显示了 V&V 手册中通过反复试验得出的拟议设置，该设置发表于 Vaidheeswaran 等（2020c）；与默认设置的直方图相比，其误差分布似乎更好。图15中的第三和第四个直方图显示了确定性校准所得的相对误差百分比分布，其中分别使用21个和11个解析样本来指导校准。类似地，左起第五和第六个直方图显示了贝叶斯校准的结果，同样分别使用11个和21个样本。从直方图可以看出，校准改善了误差分布，使119次验证运行所得相对误差百分比的平均值更接近0%的中心位置（红色水平线）。同样，校准也缩小了均值周围的分布范围。尤其是贝叶斯校准带来了最佳的精度提升，其相对误差百分比均值约为0.3%。在此前的报告（Gel等，2021）中，专门设置了一个独立章节，分析实验（本例中为解析解）可用于指导校准的样本数量所产生的影响。为简洁起见，本报告通过并列直接比较11个与21个解析

解样本来评估样本量对校准的影响。更多用于指导校准的数据点改善了贝叶斯校准结果（即，基于11个解析解的结果产生了-0.64%的平均相对误差，而基于21个解析解的结果产生了-0.3%的平均相对误差）。然而，对于确定性校准，观察到的效果恰好相反。经过调查，我们认为可能的原因与确定性校准的公式有关：该公式尝试将问题重新表述为残差最小化问题并进行优化。因此，在使用21个样本的情况下，最小化搜索很可能陷入局部极小值，导致其比基于11个样本的最小化更难满足收敛准则。尽管有此发现，与基于默认设置的结果相比，两项校准研究都显著提高了精度。

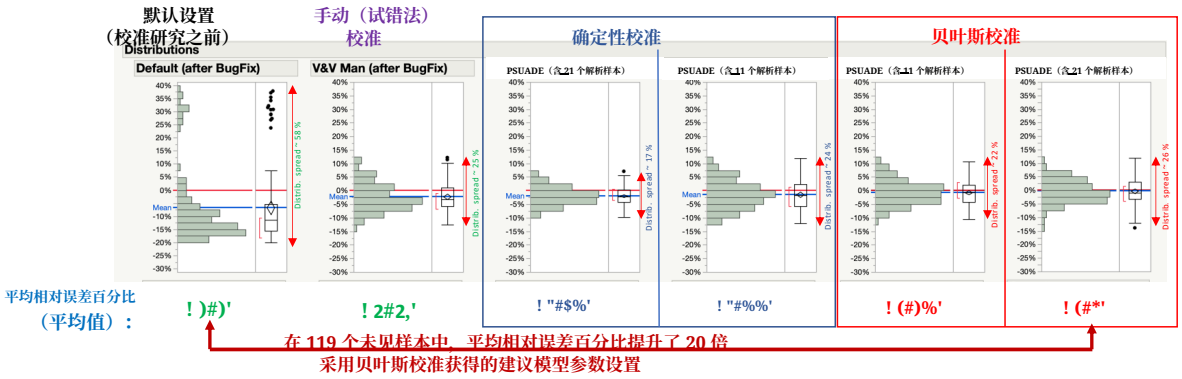

图15：校准前（默认设置）以及采用确定性和贝叶斯校准后，关注量 y2（填充激波的位置）的相对误差百分比直方图比较。

5 结论

本报告所述研究源于美国能源部（DOE）NETL 自 2010年启动的系统性验证、确认与不确定性量化工作，旨在评估 NETL 的 MFiX求解器套件的可信度。本报告承接此前三份相关报告：（1）MFiX-PIC 的验证与确认，Vaidheeswaran 等（2020c）；（2）MFiX-PIC 的敏感性分析，Vaidheeswaran 等（2020b）；（3）MFiX-PIC 的确定性校准，第 1 部分：沉降床，Gel 等（2021）。第一项研究旨在通过将模拟结果与现有实验数据直接比较，捕捉并记录 MFiX-PIC 中发现的任何差异。第二项研究旨在评估 MFiX-PIC 中可通过关键字设置的建模输入参数的敏感性，方法是考察建模输入参数变化时若干关注量的变化。第三项研究首次展示了针对关注问题配置开展系统校准（特别是确定性校准）研究。本研究是第三份报告的后续工作：针对同一问题采用另一种校准方法，并直接比较两种方法在准确性方面的改进。

本研究的主要目标是制定并展示一种程序化方法，通过对所考虑的建模参数应用确定性和贝叶斯校准方法，提高 MFiX-PIC 模拟的可信度。首先，选取了三种具有代表性的应用，以涵盖广泛遇到的流动构型：颗粒沉降、流化床和循环流化床。本报告记录了在第一种目标应用——颗粒沉降的背景下，对五个 MFiX-PIC 建模参数进行的贝叶斯校准。该问题的独特优势在于，关注量——充填激波的位置——存在解析解。因此，校准研究无需开展任何物理实验即可进行。除贝叶斯校准研究外，还考察了 Gel 等（2021）的确定性校准研究结果，并将其直接进行比较，以评估对于这一特定应用，哪种校准方法能够提高 MFiX-PIC 的准确性。

通过在区间 $[0.05, 0.25]$ 内改变初始固体浓度参数（x_1），生成了两个独立的数据集，分别包含 11 个和 21 个基于充填激波位置解析解的样本。随后，这些数据被用作类似于实验观测值的数据。尽管确定性校准未考虑实验不确定性，但在贝叶斯校准研究中引入了一些人为引入的不确定性，以模拟基于实际实验的校准研究。

确定性校准过程可表述为残差最小化（模拟值 – 实验值）问题。为了在优化过程中测试不同的模型参数设置时，执行所需的数千次评估，我们构建了一个数据拟合代理模型。在评估该模型刻画

输入和输出数据集之间关系的能力后，我们便用它代替实际的 MFiX-PIC 模拟，以节省时间。请注意，在优化循环中运行数千次 MFiX-PIC 模拟会耗费过多时间。

贝叶斯校准流程是一种更先进的方法，建立在统计框架之上。在该框架中，假定每个待校准模型参数均服从一个先验分布，该分布可基于先验数据、文献或专家意见确定。通过基于马尔可夫链蒙特卡罗的方法获得其后验分布，但这种方法的计算成本很高。为避免实际运行 MFiX-PIC 模拟来执行马尔可夫链蒙特卡罗，本文采用基于高斯过程的数据拟合代理模型；这需要先开展一项初始模拟活动，以确保能够构建质量足够好的代理模型，用于刻画输入参数与关注量之间的关系。在校准过程中，利用贝叶斯定理更新对模型参数所假定的先验分布。贝叶斯校准的结果是每个模型参数的后验分布，而非单个标量值。因此，可以更有效地评估模型参数及其影响所带来的不确定性。

由于研究持续时间较长，且在 MFiX-PIC 中发现了一个错误，该错误导致基于计算的 ROP_g（气体密度与气体体积分数的乘积）和 EP_g（气体体积分数）之间出现不一致，因此必须开展多项样本量不同的模拟活动；在修复该错误后，还需重新运行这些活动。最初，针对所考虑的六个输入参数，采用正交拉丁超立方采样方法设计了一项模拟活动，其中包含 120 个实际 MFiX-PIC 模拟样本。根据先前模拟活动中获得的见解，随后构建了一项新的活动（称为模拟活动 # 1），其样本量为原来的一半（即 60 个样本），并对六个参数的上下界作了少量调整，如表1所示。将六个输入参数所用的设置以及从模拟活动结果中获得的关注量汇总为表格格式的 ASCII 文件，作为输入提供给 UQ工具包软件，用于构建代理模型并完成其余分析。贝叶斯校准研究采用了最初基于 120 个样本的模拟活动（称为模拟活动 # 2）。不过，初始贝叶斯校准结果表明，初始模拟活动不足以覆盖参数空间边缘处的响应，因此后来又为该模拟活动增加了 64 个样本。

我们使用了劳伦斯利弗莫尔国家实验室的 UQ 软件 PSUADE（Tong，2020）来构建数据拟合代理模型，并检查代理模型的充分性和质量。此外，还使用 PSUADE 执行残差最小化，以获得最佳模型参数设置。

通过使用新的模型参数设置（θ_1，θ_2，θ_3，θ_4，θ_5）运行额外的 MFiX-PIC 模拟，并计算相应 x_1 设置下充填激波位置相对于解析解的相对误差百分比，评估校准过程中获得的拟议校准后模型参数设置的有效性。此外，在相同的 x_1设置下，分别使用 MFiX-PIC 默认设置和 V&V 手册中针对五个模型参数（θ_1，θ_2，θ_3，θ_4，θ_5）提出的设置，进行了一组新的模拟。文中还对各次模拟的相对误差百分比进行了整体比较，并以直方图形式展示了相对误差百分比。需要指出的是，由于存在解析解，因此可以对每次抽样模拟进行误差评估。当校准过程采用物理实验时，通常无法进行这种精确的误差评估。

使用 PSUADE 不确定性量化软件获得的拟议校准后的模型参数设置优于默认的 MFiX-PIC 设置以及 V&V 手册中提出的设置。结果表明，拟议校准后的模型参数设置的 % 相对误差直方图图显示，在颗粒沉降应用中可获得显著更准确的 MFiX-PIC 结果。这一结论通过一种严谨的方法得以验证，该方法使用了 119 个未见样本的 x_1 设置。同样，对于五个模型参数，基于确定性校准和贝叶斯校准的拟议设置均优于其他设置，这一点在表6和图15中均有清晰体现。
最后，表7列出了针对与颗粒沉降案例类似的应用所建议采用的 MFiX-PIC 模型参数校准设置。尽管结果表明，与默认设置和 V&V 手册建议的设置相比，基于贝叶斯校准和确定性校准的设置都能提高 MFiX-PIC 模拟结果的准确性，但就本案例而言，贝叶斯校准带来的准确性提升似乎更大。贝叶斯校准和确定性校准的平均相对误差百分比分别为 -0.3% 和 -1.94%。两者的误差分布都较为集中在均值附近。实现贝叶斯校准所需的工作量和计算开销远高于确定性校准。因此，对于处于图16所示假设流态图中颗粒沉降区域的应用，可采用贝叶斯校准设置，预计这将提高 MFiX-PIC 的准确性。

MFiX-PIC 模型参数	贝叶斯校准	确定性校准
Theta1 (θ_1): 压力线性比例因子	10.26	7.86
Theta2 (θ_2): 体积分数指数比例因子	3.53	2.28
Theta3 (θ_3): 统计权重	8.86	6.03
Theta4 (θ_4): 体积。最大值处的分数 贝博最小堆积密度	0.4	0.38
Theta5 (θ_5): 固体滑移速度因子	0.7	0.626
平均相对误差百分比	-0.30%	-1.94%

表7：基于PSUADE和Nodeworks结果验证的校准模型参数 .

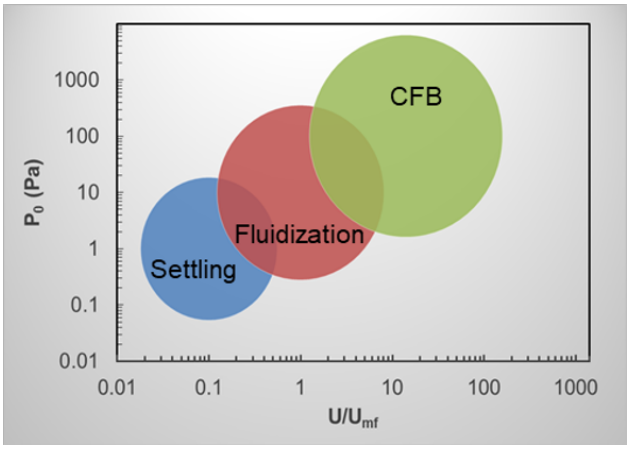

图16：假想的流态图。Vaidheeswaran 等（2020b）

未来工作的若干建议基于对代理模型质量如何影响校准研究结果的调查。例如，除了基于模拟活动 #1 开展确定性校准研究外，值得使用现有数据集进行同样的研究，采用 120 个或 184 个样本，而无需开展新的模拟活动。此外，可以筛查并剔除所有可用数据集（60 + 120 + 64）中可能重叠的样本，然后将这些数据集合并，创建一个大型模拟活动输出数据集。由于时间有限，作者未能完成这项研究，但已在附录中提供必要的输入文件，供有兴趣开展这项研究的读者使用。另一项值得开展的未来研究是进一步优化作为代理模型构建的高斯过程模型。本研究采用了 UQ工具包中的默认设置，而该工具包提供了更高级的功能，可用于调优，从而获得拟合效果更好的数据拟合代理模型。最后，颗粒沉降案例的独特之处在于，它有解析解可供使用，无需依赖通常通过物理实验获取的数据来指导校准。利用解析解可以生成任意数量的数据集（例如，11 个样本或 21 个样本）。然而，本研究并未详细探讨该数据集中的不确定性影响，而这种不确定性在物理实验中很常见。贝叶斯校准引入了一定程度的人为引入的不确定性，但并未研究校准结果对实验不确定性的敏感程度（仅针对本案例，该不确定性是人为引入解析解的）。因此，可以通过系统的敏感性研究，测试 11 个和 21 个样本解析解结果中不同不确定性水平的影响，从而更深入地了解这一问题。这对于后续的流化问题将更加重要，因为该问题有包含重复测量的物理实验数据集。

另有一份专门报告将展示第二种情况——流化床应用的确定性校准和统计校准。这些报告的总体目标是为计划开展相关模拟的 MFiX-PIC 用户提供经过验证的指导，

这些模拟涵盖所探讨的假设流动状态，同时还将提供一套统一的建议校准设置。

致谢

本研究是为支持美国能源部（DOE）化石能源交叉技术研究计划而开展的。该研究通过美国能源部国家能源技术实验室（NETL）研究与创新中心的先进反应堆设计计算流体力学（CARD）现场工作提案执行。

作者谨向 William A. Rogers 博士致谢，感谢他在开展本研究过程中提供的项目指导、方向指引和大力支持。

作者感谢劳伦斯利弗莫尔国家实验室的 Charles Tong 博士在使用 PSUADE 方面提供的支持，包括通过修改导出的代理模型，使 PSUADE 能够执行确定性校准工作流程，并就 PSUADE 贝叶斯校准功能的使用提供说明。最后，作者谨向 Jean-François Dietiker 博士致谢，感谢他持续提供反馈和建议，帮助提升本研究的质量。

免责声明

本项目部分经由现场支持合同获得美国能源部国家能源技术实验室资助。美国政府及其任何机构、其任何雇员、支持承包商及其任何雇员均不对所披露的任何信息、设备、产品或流程的准确性、完整性或实用性作出任何明示或暗示的保证，也不承担任何法律责任或义务，亦不表示其使用不会侵犯私人所有权。本文提及任何特定商业产品、流程或服务时使用其商品名称、商标、制造商名称或其他名称，并不一定构成或暗示美国政府或其任何机构对其予以认可、推荐或偏袒。本文所表达的作者观点和意见不一定代表美国政府或其任何机构的观点或立场。

参考文献

Aytekin Gel、Avinash Vaidheeswaran、Jordan Musser 和 Charles H Tong。朝着建立颗粒流与多相流验证、确认与不确定性量化框架迈进，第1部分：筛选研究与敏感性分析。《验证、确认与不确定性量化学报》，3(3)，2018年。Avinash Vaidheeswaran、Franklin Shaffer 和 Balaji Gopalan。循环流化床提升管中 Geldart A类颗粒速度波动的统计特征。《物理评论：流体》，2(11):112301，2017年。Avinash Vaidheeswaran、Rupendranath Pandey、Mary Ann Clarke、Huda Ashfaq 和 William A Rogers。A类玻璃颗粒的流化：实验与初步验证。技术报告，国家能源技术实验室（NETL），匹兹堡（宾夕法尼亚州）、摩根敦（西弗吉尼亚州）……，2020a。Avinash Vaidheeswaran 和 Steven Rowan。鼓泡流化床压力信号的混沌与递归分析。《混沌、孤子与分形》，142:110354，2021年。Avinash Vaidheeswaran、Cheng Li、Huda Ashfaq、Xiongjun Wu、Steven Rowan 和 William A Rogers。B类玻璃颗粒鼓泡流化的验证实验。《实验与计算多相流》，4(3):264–273，2022年。JE Higham、Mehrdad Shahnam 和 Avinash Vaidheeswaran。利用本征正交分解阐明颗粒流的特征。《颗粒物质》，22(4):1–13，2020。Jonathan E Higham、Mehrdad Shahnam 和 Avinash Vaidheeswaran。台架规模脉冲流化床中的反常扩散。《物理评论*E*》，103(4):043103，2021年。Xi Gao、Jia Yu、Cheng Li、Rupen Panday、Yupeng Xu、Tingwen Li、Huda Ashfaq、Bryan Hughes 和 William A Rogers。生物质-玻璃珠二元流化的综合实验研究：用于 CFD 模型验证的数据集。《*AIChE*期刊》，66(2):e16843，2020。Liqiang Lu、Jia Yu、Xi Gao、Yupeng Xu、Mehrdad Shahnam 和 William A Rogers。砂粒与 Geldart A类生物质协同流化的实验与数值研究。《*AIChE*期刊》，66(6):e16969，2020。

Cheng Li、Xi Gao、Steven L Rowan、Bryan Hughes 和 William A Rogers。利用机器学习辅助图像处理测量非球形与球形颗粒的二元流化。《*AIChE*期刊》，页码 e17693，2022年。Avinash Vaidheeswaran、Aytekin Gel 和 Mary Ann Clarke。沉降床、鼓泡流化床和循环流化床中颗粒单元法建模参数的敏感性分析。NETL TRS 报告 NETL-TRS-**X**-2020，NETL，2020b。Avinash Vaidheeswaran、Aytekin Gel、Mary Ann Clarke 和 William A Rogers。MFiX 颗粒单元法中的模型参数评估。《先进粉末技术》，32(8):2962–2977，2021年。Aytekin Gel、Avinash Vaidheeswaran 和 Mary Ann Clarke。MFiX-PIC 的确定性校准，第1部分：沉降床。NETL TRS 报告 DOE.NETL-2021.2646，国家能源技术实验室（NETL），匹兹堡（宾夕法尼亚州）、摩根敦（西弗吉尼亚州）……，2021年。Mary Ann Clarke 和 Jordan M Musser。MFiX 颗粒单元法（MFiX-PIC）理论指南。NETL TRS 报告 NETL-TRS-2020/2115，NETL，2020。Felipe AC Viana。关于拉丁超立方设计，你想了解却不敢提问的那些事。载于第*10*届世界结构与多学科优化大会，第19卷。sn，2013年。Aytekin Gel、Rahul Garg、Charles Tong、Mehrdad Shahnam 和 Chris Guenther。将不确定性量化应用于多相流计算流体力学。《粉末技术》，242:27–39，2013a。Aytekin Gel、Tingwen Li、Balaji Gopalan、Mehrdad Shahnam 和 Madhava Syamlal。多相计算流体力学模型的验证与不确定性量化。《工业与工程化学研究》，52(33):11424–11435，2013b。Aytekin Gel、Mehrdad Shahnam、Jordan Musser、Arun K Subramaniyan 和 Jean-Francois Dietiker。台架规模流化床气化炉计算流体力学模拟的非侵入式不确定性量化。《工业与工程化学研究》，55(48):12477–12490，2016年。Ilya M Sobol。非线性数学模型的全局敏感性指数及其蒙特卡洛估计。《数学与计算机模拟》，55(1-3):271–280，2001年。Bertrand Iooss 和 Paul Lemaître。全局敏感性分析方法综述。载于复杂系统模拟优化中的不确定性管理，第101–122页。Springer，2015年。Brian M Adams、Patricia D Hough 和 Laura Painton Swiler。DAKOTA 软件培训：模型校准。技术报告，桑迪亚国家实验室（SNL-NM），阿尔伯克基（新墨西哥州，美国），2015年。Timothy G Trucano、Laura Painton Swiler、Takera Igusa、William L Oberkampf 和 Martin Pilch。校准、验证与敏感性分析：概念辨析。《可靠性工程与系统安全》，91(10-11):1331–1357，2006年。Ralph T Muehleisen 和 Joshua Bergerson。贝叶斯校准——是什么、为什么以及如何进行。第8页，2016年。Marc C. Kennedy 和 Anthony O'Hagan。计算机模型的贝叶斯校准。《英国皇家统计学会学报：*B*辑（统计方法学）》，63(3):425–464，2001年。ISSN 1467-9868。doi:https://doi.org/10.1111/1467- 9868.00294。URL https://rss.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/1467-9868.00294。_eprint: https://rss.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/1467-9868.00294。Robert B. Gramacy、Derek Bingham、James Paul Holloway、Michael J. Grosskopf、Carolyn C. Kuranz、Erica Rutter、Matt Trantham 和 R. Paul Drake。对模拟辐射激波流体动力学的大型计算机实验进行校准。《应用统计年鉴》，9(3)，2015年9月。ISSN 1932-6157。doi:10.1214/15-AOAS850。URL http://arxiv.org/abs/1410.3293。arXiv: 1410.3293。Kathryn A. Maupin 和 Laura P. Swiler。跨实验设置的模型差异校准。《可靠性工程与系统安全》，200:106818，2020。出版商：Elsevier。Serge Guillas、Nina Glover 和 Liora Malki-Epshtein。街谷流 CFD 模型中 k–e 湍流模型常数的贝叶斯校准。《计算机方法在应用力学与工程中的应用》，279:536–553，2014年9月。ISSN 00457825。doi:10.1016/j.cma.2014.06.008。URL https://linkinghub.elsevier.com/ retrieve/pii/S0045782514001947。You Ling、Joshua Mullins 和 Sankaran Mahadevan。贝叶斯校准中模型差异先验的选择。《计算物理学杂志》，276:665–680，2014年11月。ISSN 0021-9991。doi:10.1016/j.jcp.2014.08.005。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999114005518。Paul D. Arendt、Wei Chen 和 Daniel W. Apley。更新预测模型：校准、偏差修正与可辨识性。载于第*1*卷：第*36*届设计自动化会议，*A*辑与*B*辑，第1089–1098页，蒙特利尔，

加拿大魁北克，2010年1月。ASMEDC。ISBN 978-0-7918-4409-0。doi:10.1115/DETC2010-28828。网址：https: // asmedigitalcollection.asme.org/IDETC-CIE/proceedings/IDETC-CIE2010/44090/1089/340480。Ning Wang、Wen Yao、Yong Zhao 和 Xiaoqian Chen。《基于 Takagi–Sugeno 模糊模型的计算机模型贝叶斯校准》。《计算机方法与应用力学和工程》，378:113724，2021年5月。ISSN 00457825。doi:10.1016/j.cma.2021.113724。网址：https://linking.hub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045782521000608。Felipe A. C. Viana 和 Arun K. Subramaniyan。《科学建模中的贝叶斯校准与物理信息神经网络综述》。《计算工程方法档案》，2021年2月。ISSN 1134-3060，1886-1784。doi:10.1007/s11831-021-09539-0。网址：http://link.springer.com/10.1007/ s11831-021-09539-0。Charles Tong。《不确定性分析与设计探索问题求解环境》，版本01，2010年5月。网址：https://www.osti.gov//servlets/purl/1325009。Charles Tong。《不确定性分析与设计探索问题求解环境（PSUADE）》，2020年8月。网址：https://computing.llnl.gov/projects/psuade/software。网址：https://computing. llnl.gov/projects/psuade/software。Brian M Adams。《用于并行优化与不确定性分析的 DAKOTA 工具包》。技术报告，桑迪亚国家实验室（SNL-NM），美国新墨西哥州阿尔伯克基，2008年。Brian M Adams、William J Bohnhoff、KR Dalbey、JP Eddy、MS Eldred、DM Gay、K Haskell、Patricia D Hough 和 Laura P Swiler。《DAKOTA：用于设计优化、参数估计、不确定性量化和敏感性分析的多层并行面向对象框架：5.0版用户手册》。桑迪亚国家实验室，技术报告 *SAND2010-2183*，2009年。Justin Weber、William Fullmer、Aytekin Gel 和 Jordan Musser。《使用多相流计算流体动力学优化旋风分离器》。《流体工程学报》，142(3)，2020年。Avinash Vaidheeswaran、Jordan Musser 和 Mary Clarke。《MFiX-PIC 的验证与确认》。NETL 技术报告 NETL-TRS-2-2020，NETL，2020c。MFiX。《MFiX 21.2 版本更新：修复 MFiX-PIC 中的错误》，2021年。网址：https://mfix. netl.doe.gov/mfix-21-2-release-announcement/。网址：https://mfix.netl.doe.gov/ mfix-21-2-release-announcement/。NETL。《MFIX 求解器套件文档》。网址：https://mfix.netl.doe.gov/mfix/mfix-documentation/。

附录

本附录旨在提供必要信息，帮助读者尽可能复现本报告的结果；但由于该过程本身存在随机性，且安装的 UQ 软件版本可能不同，复现结果可能会有所差异。我们预期读者已获得相关软件的使用权限，并具备使用相关软件及分析其结果所需的高级技能。此外，所提供的表格形式输入数据集可用于测试不同方法，因为它们汇总了模拟活动的结果，并附有相关详细信息。对于希望了解缺失方面或其他相关问题的读者，建议通过电子邮件联系该出版物的通讯作者（aike@alpemi.com）。

本节讨论的文件可通过 NETL 的 GitLab代码库获取，网址如下:
https://mfix.netl.doe.gov/gitlab/quality-assurance/PIC_calibration/-/tree/main/Case1_ParticleSettling

NETL GitLab代码库的注册要求已取消，现已公开 .
用户可在 Linux 控制台终端中使用以下 git clone 命令克隆所有与 PIC 校准相关研究的代码仓库，然后导航到存放确定性校准相关文件的文件夹:

>gitclonehttps://mfix.netl.美国能源部.gov/gitlab/quality –assurance/PIC_calibration.git>cd PIC 标定_ / 案例 1 _ 颗粒沉降

对于使用基于 GUI 的 Git 客户端的用户，可以指向 https://mfix.netl.doe.gov/gitlab/ quality-assurance/PIC_calibration.git，并将代码仓库克隆到本地系统。
代码仓库由以下三个顶层子目录组成:

- **确定性校准** 包含用于此前发表的确定性校准研究（Gel等，2021）的文件。请注意，此文件夹中的结果基于修复漏洞之前的 MFiX-PIC，该漏洞随 MFiX 21.2 版 MFiX（2021）一同修复并发布。
- **确定性校准_因漏洞修复而更新的结果** 包含由模拟活动 #1 生成的输入文件，用于开展本报告所述的确定性校准研究。由于上述漏洞修复问题，特创建了一个单独的目录用于确定性校准研究，同时将原始结果保留在 DeterministicCalibration 下。
- **贝叶斯校准** 包含由模拟活动 # 2 生成的输入文件，用于开展本研究中介绍的贝叶斯校准研究。

README.md 文件中展示了目录树，概述了此代码仓库中全部目录和所存文件的组织结构。在本附录的其余部分，所示的操作系统级命令示例均假定使用 bash shell 环境。读者应使用“echo $SHELL”检查其 shell 环境，并根据需要进行调整。

A PSUADE 使用的输入文件

所有 PSUADE 分析均使用 2.0 版执行。假设用户已正确设置环境和 PSUADE 2.0 二进制文件的路径。

A.1 将外部数据集导入 PSUADE

模拟活动 #1（确定性校准）所用文件及其代码仓库超链接列表:

C1_SIM7_结果_OLH_n60_i6_o3.xlsx：Microsoft® Excel 文件，包含模拟数据集，其中包括输入参数以及从模拟结果中提取的所有感兴趣量。
C1_SIM7_OLH_n60_i6_o1_y2.dat：60 个样本，包含 6 个输入和 1 个感兴趣量（不含列标题），以纯 ASCII 数据格式提供。

C1_SIM7_OLH_n60_i6_o1_y2.csv：60 个样本，包含 6 个输入和 1 个感兴趣量（包括列标题），以 CSV 格式提供

psData_SIM7_n60_i6_o1_y2：导入上述 CSV 或 DAT 文件后生成的 PSUADE 原生数据文件。请注意，仅将填充激波的位置作为感兴趣量。

模拟活动 # 2（贝叶斯校准）所用文件及其指向代码仓库的超链接列表：

包含仿真数据集的 Excel 文件 C2_SIM6Merged_OLH_n184_i6_o1_y2.csv：184 个样本，包含 6 个输入和 1 个感兴趣量（包括列标题），以 CSV 格式提供。C2_SIM6_OLH_n120_i6_o1_y2.csv：120 个样本，包含 6 个输入和 1 个感兴趣量（包括列标题），以 CSV 格式提供。psData_Merged_n184：导入上述 CSV 或 DAT 文件后生成的 PSUADE 原生数据文件。请注意，其中仅将 y2：填充冲击位置作为感兴趣量。

所用文件的简要说明：

除了实际数据集外，PSUADE 还需要一个包含 PSUADE 命令语法的输入文件，才能执行任何类型的分析。此文件的默认文件名为 psuadeData。强烈建议读者使用其他名称，例如 psData，因为 PSUADE 会在不发出警告的情况下覆盖 psuadeData。

通常，模拟活动结果会整理成表格格式。前几列表示试验设计中的输入参数，其余列则报告相应的关注量。每一行代表模拟活动中的一个样本。图 17 展示了本报告某项模拟活动中前 40 行数据的截图。为便于使用 PSUADE 进行分析，这些数据已在 Microsoft® Excel 中制成表格。该 Microsoft® Excel 文件保存在代码仓库中，路径为“C1_SIM7_Results_OLH_n60_i6_o3.xlsx”，可通过以下链接访问：

https://mfix.netl.doe.gov/gitlab/quality-assurance/PIC_calibration/-/blob/main/Case1_ParticleSettling/DeterministicCalibration_UpdatedResultsDueBugFix/PSUADE/C1_SIM7_Results_OLH_n60_i6_o3.xlsx.

	不确定输入参数/因素：								关注量或响应变量：		
MFiX-PIC	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_1			Y1	Y2	Y3
模拟	颗粒压力								位置	位置	空隙率
数量	指数	体积分数指数 比例因子	静态 粘度	空隙率 最大堆积比	速度系数	初始值 浓度			沉降激波	弥撒激波	第一个单元处
1	7.168	2.866	3.928	0.428	0.835	0.150			0.586	0.079	0.431
2	17.101	3.420	4.523	0.415	0.887	0.204			0.632	0.096	0.402
3	13.251	2.975	9.372	0.430	0.667	0.103			0.537	0.061	0.435
4	0.984	3.532	10.735	0.426	0.789	0.245			0.668	0.089	0.431
5	8.488	3.187	14.798	0.392	0.812	0.224			0.651	0.089	0.399
6	11.405	4.135	5.448	0.418	0.854	0.098			0.522	0.056	0.421
7	17.237	4.320	10.455	0.383	0.539	0.146			0.602	0.070	0.388
8	7.907	2.613	8.150	0.409	0.635	0.250			0.680	0.097	0.414
9	4.045	4.756	12.509	0.421	0.822	0.141			0.568	0.071	0.423
10	3.369	2.910	6.001	0.386	0.547	0.233			0.677	0.084	0.389
11	18.878	4.709	10.031	0.402	0.842	0.239			0.649	0.105	0.399
12	3.085	2.415	14.329	0.417	0.757	0.180			0.638	0.085	0.425
13	10.000	4.210	11.681	0.399	0.894	0.177			0.605	0.070	0.330
14	3.673	3.243	7.848	0.401	0.738	0.100			0.535	0.060	0.404
15	9.761	2.284	12.940	0.425	0.553	0.074			0.513	0.045	0.432
16	11.916	4.047	15.000	0.409	0.655	0.194			0.651	0.077	0.440
17	14.379	3.985	8.480	0.400	0.507	0.061			0.479	0.039	0.406
18	16.755	2.824	11.091	0.396	0.809	0.055			0.471	0.036	0.402
19	6.325	4.627	4.891	0.415	0.567	0.052			0.455	0.036	0.418
20	18.260	3.590	5.835	0.385	0.830	0.119			0.552	0.066	0.390
21	6.629	3.954	9.204	0.382	0.765	0.202			0.629	0.091	0.384
22	4.740	2.209	13.265	0.388	0.850	0.108			0.557	0.056	0.391
23	15.261	2.000	8.978	0.416	0.771	0.138			0.583	0.072	0.424
24	14.555	3.687	13.984	0.427	0.875	0.088			0.530	0.051	0.431
25	2.801	3.857	3.462	0.424	0.729	0.078			0.485	0.051	0.425
26	1.239	3.388	11.914	0.396	0.649	0.083			0.520	0.049	0.400
27	10.855	3.299	7.070	0.418	0.502	0.226			0.672	0.090	0.423
28	6.044	3.071	9.549	0.404	0.900	0.164			0.603	0.071	0.361
29	13.907	2.335	8.320	0.384	0.867	0.185			0.609	0.081	0.378
30	12.518	4.217	11.636	0.420	0.582	0.121			0.562	0.063	0.424
31	0.488	2.759	9.986	0.413	0.590	0.151			0.600	0.072	0.415
32	9.048	4.936	8.652	0.428	0.612	0.209			0.658	0.085	0.431
33	8.465	5.000	6.484	0.408	0.801	0.124			0.560	0.070	0.410
34	15.535	3.102	3.604	0.411	0.528	0.111			0.526	0.066	0.417
35	2.054	4.867	13.582	0.404	0.526	0.173			0.647	0.066	0.420
36	10.602	3.459	9.715	0.389	0.701	0.051			0.479	0.032	0.394
37	13.605	2.576	13.900	0.398	0.571	0.206			0.652	0.075	0.406
38	11.609	3.016	12.312	0.380	0.721	0.158			0.607	0.073	0.386
39	7.037	2.023	10.953	0.393	0.518	0.127			0.570	0.063	0.400
40	5.675	4.590	14.429	0.385	0.616	0.095			0.545	0.051	0.427

图 17：前 40 个样 本，来自模拟活动 #1 中包含 60 个样本的表格数据集，用于沉 x
输入参数和 三个关注量。

图 18 展示了一个 ASCII 格式文件的前 44 行，该文件根据图 17 所示的表格结果生成。请注意，该 ASCII文件还包含一行额外的标题，表明此次模拟活动包含 120 个样本，涉及六个输入参数和一个输出（即仅包含第二个关注量 y_2：填充冲击位置）。随后将此文件导入 PSUADE。此特定 ASCII 文件保存在代码仓库中，文件名为“C1_SIM7_OLH_n60_i6_o1_y2.dat”，可通过以下地址访问：
https://mfix.netl.doe.gov/gitlab/quality-assurance/PIC_calibration/-/blob/main/Case1_ParticleSettling/DeterministicCalibration_UpdatedResultsDueBugFix/PSUADE/C1_SIM7_OLH_n60_i6_o1_y2.dat

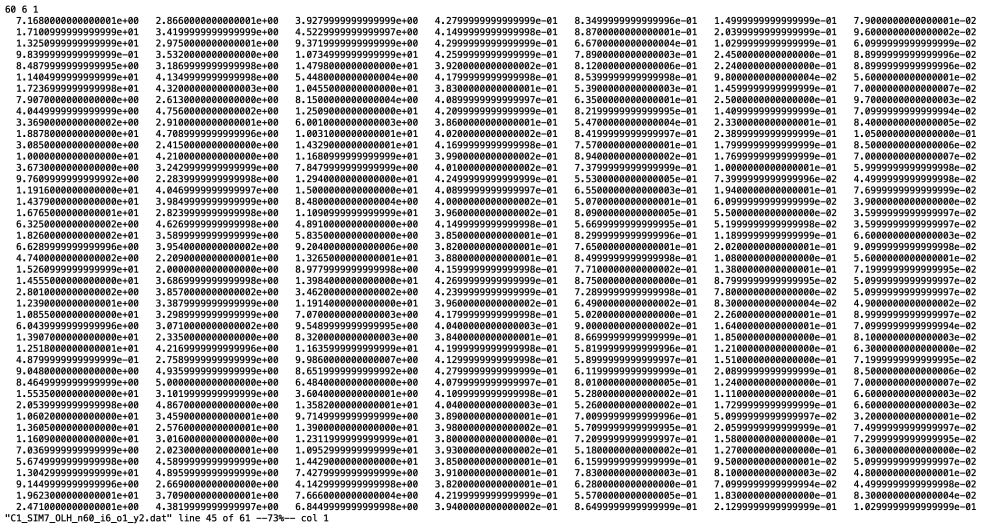

图 18：模拟活动 #1 中 60 个样本、六个输入参数和一个关注量所获得的表格数据集的前 44 行。

模拟活动数据集（C1_SIM7_OLH_n60_i6_o1_y2.dat）的内容可以在命令行模式下交互式运行 PSUADE 时，使用 read_std 命令导入 PSUADE。此外，如果将文件保存为 CSV 格式，则可以使用 read_csv 命令导入其内容。有关如何从 ASCII 或 CSV 文件导入数据的详细信息，请参阅 PSUADE 1.7 参考手册（第 3 页）。

图 19 显示了导入文件的标题部分。请注意，用于指示模拟活动中的样本数量、六个输入参数和一个输出的 ASCII 标题行，现已重新格式化为 PSUADE 原生文件格式。此 PSUADE 原生数据文件保存在代码仓库中，路径为 "psData_SIM7_n60_i6_o1_y2"，可通过以下地址访问：

https://mfix.netl.doe.gov/gitlab/quality-assurance/PIC_calibration/-/blob/main/Case1_ParticleSettling/确定性校准_UpdatedResultsDueBugFix/PSUADE/psData_SIM7_n60_i6_o1_y2.

需要注意的是，PSUADE 默认会生成文件 psData_SIM7_n60_i6_o1_y2，其中包含一个 INPUT 部分，将 x1、x2、x3、…列为输入参数的名称，并将 y1、y2、y3、…列为关注量的名称。建议用户编辑 psData_SIM7_n60_i6_o1_y2，并重命名输入参数和关注量参数，以更恰当地体现其含义。例如，在图2中，第487行的 x1 已重命名为 t1:P_0，第510行的 y1 已重命名为 y2:LocFilling)。

```
PSUADE_IO (Note : inputs not true inputs if pdf ~=U)
6 1 60
1 1
  7.1680000000000001e+00
  2.8660000000000001e+00
  3.9279999999999999e+00
  4.2799999999999999e-01
  8.3499999999999996e-01
  1.4999999999999999e-01
  7.9000000000000001e-02
2 1
  1.7100999999999999e+01
  3.4199999999999999e+00
  4.5229999999999997e+00
  4.1499999999999998e-01
  8.8700000000000001e-01
  2.0399999999999999e-01
  9.6000000000000002e-02
3 1
  1.3250999999999999e+01
  2.9750000000000001e+00
  9.3719999999999999e+00
  4.2999999999999999e-01
  6.6700000000000004e-01
  1.0299999999999999e-01
  6.0999999999999999e-02
4 1
  9.8399999999999999e-01
  3.5320000000000000e+00
  1.0734999999999999e+01
  4.2599999999999999e-01
  7.8900000000000003e-01
  2.4500000000000000e-01
  8.8999999999999996e-02
5 1
  8.4879999999999995e+00
  3.1869999999999998e+00
  1.4798000000000000e+01
  3.9200000000000002e-01
  8.1200000000000006e-01
  2.2400000000000000e-01
  8.8999999999999996e-02
6 1
  1.1404999999999999e+01
  4.1349999999999998e+00
"psData_SIM7_n60_i6_o1_y2" 827L, 23043B
```

图 19：从数据集 inC1_SIM7_OLH_n60_i6_o1_y2.dat 导入后获得的 PSUADE 原生输入文件 psData_SIM7_n60_i6_o1_y2 的前 45 行。

```
  6.0999999999999999e-02
  4.1000000000000002e-02
60 1
  1.9302000000000000e+01
  2.4809999999999999e+00
  4.9499999999999998e+00
  3.9400000000000002e-01
  6.7600000000000005e-01
  1.7000000000000001e-01
  8.5999999999999993e-02
PSUADE_IO
PSUADE
INPUT
   dimension = 6
   variable 1 t1:P0  =   4.8799999999999999e-01   1.9998000000000001e+01
   variable 2 t2:beta  =   2.0000000000000000e+00   5.0000000000000000e+00
   variable 3 t3:StatWeight  =   3.0009999999999999e+00   1.5000000000000000e+01
   variable 4 t4:ep_g  =   3.8000000000000000e-01   4.2999999999999999e-01
   variable 5 t5:VelfacCoeff  =   5.0200000000000000e-01   9.0000000000000002e-01
   variable 6 x1:InitConc  =   5.0999999999999997e-02   2.5000000000000000e-01
#  PDF <inpNum> N  <mean> <std>
#  PDF <inpNum> L  <logmean> <std>
#  PDF <inpNum> T  <center> <halfbasewidth>
#  PDF <inpNum> B  <alpha> <beta>
#  PDF <inpNum> G  <alpha> <beta>
#  PDF <inpNum> W  <lambda> <K>
#  PDF <inpNum> IG <alpha> <beta>
#  PDF <inpNum> C  <X0> <gamma>
#  PDF <inpNum> E  <lambda>
#  PDF <inpNum> F  <D1> <D2>
#  PDF <inpNum> S  <filename> <index>
#  COR <inpNum> <inpNum> <value>
#  num_fixed = <count>
#  fixed <num> = <value>
END
OUTPUT
   dimension = 1
   variable 1 y2:LocFilling
END
METHOD
   sampling = MC
#  sampling = FACT
#  sampling = LH
#  sampling = OA
#  sampling = OALH
```

图20：PSUADE 原生数据文件中的 INPUT 块（此处显示 psData_SIM7_n60_i6_o1_y2 的第 473–517 行），其中显示了修订后的输入和输出参数标签。

如前所述，本附录中展示且可从 GitLab代码库 获取的文件，是具备足够 PSUADE 使用经验的研究人员开始构建代理模型所需的最小文件集，使用这些文件可以开始构建

仿真活动结果，然后继续开展后续的不确定性量化研究，例如敏感性分析或贝叶斯校准。为避免经验较少的用户产生困惑，文中未提供其余 PSUADE 脚本文件。如需更多信息和文件，可通过电子邮件 (aike@alpemi.com) 联系通讯作者。